

# **Hidrogeológiai és vízbányászati modellek megbízhatóságának növelése**

MTA doktori értekezés

**Szűcs Péter**

**Miskolc - Egyetemváros, 2008**

## Tartalomjegyzék

1. Szakmai kihívások, tudományos célkitűzések	2
2. Az alkalmazott vizsgálati módszerek	7
3. Új tudományos eredmények és megállapítások	14
3.1. Inverziós feladat a hidrogeológiai és vízbányászati modellezésben	14
3.2. Globális optimalizáció a hidrogeológiában	21
3.3. A leggyakoribb érték (MFV) módszerének bevezetése a hidrogeológiai és vízbányászati modellfeladatok megoldásában	26
3.4. Az MFV módszer és a globális optimalizáció alkalmazása szintetikus és terepi modellezési problémákban	36
3.5. Nem-paraméteres többváltozós regresszió szerepe a hidrogeológiai és vízbányászati modellek vizsgálatában	51
3.6. Esettanulmányok az ACE algoritmus alkalmazására	63
4. A tudományos eredmények összefoglalása és gyakorlati alkalmazása	90
5. Köszönetnyilvánítás	96
6. Felhasznált irodalom	97
7. Az értekezésben hivatkozott, a Ph.D. fokozat megszerzése (1996) után megjelent publikációk	104
8. Ábrajegyzék	118
9. Táblázatjegyzék	121

## **1. Szakmai kihívások, tudományos célkitűzések**

Egyetemi tanulmányaim után okleveles geofizikus-mérnökként végeztem a Nehézipari Műszaki Egyetemen (mai nevén a Miskolci Egyetemen) 1988-ban Miskolcon. Tudományos pályámat rögtön ezután 1988 szeptemberében a Geofizikai Tanszéken kezdtem el Dr. Takács Ernő tanszékvezető és Dr. Steiner Ferenc professzor urak szakmai vezetésével. A Geofizikai Tanszéken 7 évet töltöttem el, ahol megismerkedtem a fizikai és matematikai modellezés módszereivel, és szakterületemmé az olajipari mélyfúrási geofizika vált. Emellett a tanszéken bekapcsolódhattam abba a geostatisztikai kutatócsoportba is, amelyet Dr. Steiner Ferenc vezetett. Ez az időszak tudományos szempontból nagyon hasznos és izgalmas volt, hiszen számos új, földtudományi alkalmazáshoz kapcsolódó alkalmazott matematikai és statisztikai eljárás kidolgozásában vehettem részt. Ennek az időszaknak számos új eredménye jelent meg az „Optimum methods in statistics.” c. könyvben, amely az Akadémiai kiadónál jelent meg Dr. Steiner Ferenc Ph.D. tudományos vezetőm szerkesztésében 1997-ben (Steiner 1997). E könyv három fejezetének szerzőjeként (Szűcs 1997) tulajdonképpen összegezhettem azokat a legfontosabb kutatási eredményeket, amelyeket a Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén érhettem el. A geostatisztikai módszerek alkalmazása mellett ekkor már javában foglalkoztam földtudományi inverziós eljárásokkal is, amely kutatási vonal kialakulása és megerősödése a Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén Dr. Dobróka Mihály professzor nevéhez köthető (Dobróka 2001). Ezen hatások eredményeként speciális, több mélységszintet szimultán figyelembe vevő mélyfúrási geofizikai inverziós eljárást dolgoztam ki közetfizika és fluidum telítettség paraméterek meghatározásának céljából. A kidolgozott eljárást algyői és egyéb hazai olajipari mélyfúrású kutak mérési adatainak segítségével finomítottam, illetve kalibráltam és validáltam (Szűcs and Civan 1997; Steiner, Hajagos, Hursán és Szűcs 1998).

1995-ben átkerültem az MTA Bányászati Kémiai Kutatólaboratóriumának Rezervoármechanikai Osztályára, ahol ezután egy nagyszerű szakmai is emberi közösség tagjaként három évig dolgoztam. Dr. Lakatos István igazgató professzor és Dr. Tóth János osztályvezető segítségével és irányításával a rezervoármechanika területén továbbra is modellezési eljárásokkal foglalkozhattam (Szűcs és Robonyi 1997; Szűcs, Tóth és Robonyi 1998; Robonyi és Szűcs 1998). Ebben az időszakban a munkahely jellegénél fogva egyre több időt tölthettem laboratóriumi kísérletekkel, amelyek nagyon fontosak

voltak a számomra újabb és újabb rezervoármechanikai problémák megértésében (Lakatos I. (Ed.) 2007). Ekkor kutatásaim középpontjában a szénhidrogén-bányászati kitermelést jelentősen csökkentő formációkárosodási folyamatok matematikai modellezése, és a felszín alatti többfázisú áramlási rendszerek szimulációja állt (Szűcs és Robonyi 1998; Szűcs, Tóth és Robonyi 1999; Szűcs és Tóth 2001). Az intézet szerteágazó hazai és külföldi kapcsolatai révén még tovább erősödtek azok a szálak, amelyek az olajiparhoz kötöttek. A kifejlesztett rezervoármechanikai modelleket sok esetben laboratóriumi vizsgálatok segítségével tudtuk kalibrálni, illetve továbbfinomítani mielőtt ipari alkalmazásra kerültek volna (Szűcs, Tóth és Palásthy 1999 a,b; Szűcs, Tóth, Palásthy, Robonyi és Petró 2000).

1998 tavaszán professzor Dr. Kovács Ferenc, a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Karának dékánja, hívta fel a figyelmemet egy egyetemi docensi pályázatra, amely a Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai Tanszékre szólt. Hosszas dilemma után benyújtottam pályázatomat, amely sikeres volt, s így 1998. július 1-jétől a Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai Tanszéken dolgozom egyetemi docensként. Ez a kutatói profilváltás igen nagy kihívásnak tűnt. A hidrogeológia területe részben új volt, másrészt azonban az is hamar kiderült, hogy nagyon jól tudom hasznosítani a korábbi munkahelyeimen szerzett ismereteimet és tapasztalataimat a felszín alatti vizekkel kapcsolatos kutatásokban. Az új szakterületre való beilleszkedésben nagyon sok segítséget kaptam Dr. Szabó Imre tanszékvezető és Dr. Juhász József professzor uraktól. Itt is hamar megtaláltam azokat a kutatási területeket, amelyeket a mai napig is folytatok nagy érdeklődéssel (Petró és Szűcs 2000 a,b; Petró és Szűcs 2001; Szűcs 2002). A hidrogeológiai modellezés és a felszín alatti vizek áramlási viszonyainak tématerülete mind a mai napig számos izgalmas kérdéskört tartogat a számomra. Érdekes volt megtapasztalni a hidrogeológia tudományának kétarcúságát. A nagyon bonyolult és összetett természettudományos elméleti alapok mellett a hidrogeológiában mind a mai napig nagyon sok egyszerű és összetett empirikus összefüggést és eljárást is alkalmazunk a különböző jelenségek leírására (Nyári, Szűcs és Tildy 2003).

Tudományos fejlődésemben nagyon nagy szerepe volt a külföldi ösztöndíjaknak és meghívásoknak. Sokan azt mondják, hogy jó időben végeztem el az egyetemet. Magam is így gondolom, hiszen a kilencvenes évek elején, amikor már kezdtem az első kutatási eredményeimet elérni, megnyílt a világ a hazai kutatói társadalom számára is. Közel három

évet tölthettem összesen több utazás alkalmával különböző kiváló szakmai műhelyekben külföldön. Ezek közül is kiemelném azt, hogy kétszer is Fulbright kutató ösztöndíjat kaphattam az USA-ban. A világhírű Dr. Faruk Civan professzorral a mai napig tartó szakmai és baráti kapcsolatot sikerült kialakítani a University of Oklahoma intézményben (Szűcs, Civan and Tóth 2006). A Fulbright ösztöndíjasként végzett hidrogeológiai modellezési eredményeim vezettek ahhoz a meghíváshoz, amelyet szakmai munkám eddigi csúcsának érzek. 2006 tavaszán külföldi publikációim alapján a világhírű kaliforniai Stanford University-ről egy 2 hónap hosszúságú vendég professzori meghívást kaptam. A 18 Nobel díjas oktatóval rendelkező Stanford University intézményben végzett kutatói munka életem legnagyobb szakmai élményei közé tartozik (Szűcs and Horne 2007).

Szintén nagyon sokat jelentett szakmai fejlődésemben a világhírű hidrogeológus, professzor Dr. Tóth József 2 és fél hónapos vendégprofesszori meghívása a University of Alberta intézménybe Kanadában 2000-ben (Szűcs és Tóth 2001 a,c). Ott vált igazán világossá számomra az, hogy a felszín alatti áramlási rendszerek pontos ismerete mennyire fontos számtalan természettudományos és műszaki kérdés helyes megválaszolásában. Ott vált világossá az is, hogy mit jelent az, hogy a felszín alatti víz földtani tényező (Tóth 1999). Megismerhettem azt is, hogy a Kárpát-medence egy egyedülálló hidrogeológiai laboratórium, ahol szinte minden fajta érdekes felszín alatti vizeket érintő jelenség megfigyelhető (Erdélyi 1979; Szabó I, Szabó A, Szűcs P, Lénárt, Dassargues and Drobot 2003; Alföldi és Kapolyi 2007). Dr. Tóth Józseffel kialakított szakmai kapcsolat vezetett oda, hogy az ELTE Alkalmazott és Környezetföldtani Tanszékén 2001 óta meghívott előadóként oktathatok, illetve Mádlné Dr. Szőnyi Judit egyetemi docens asszonnyal közös szakmai és tudományos témát indíthattunk el (Tóth József et al. 2000).

A szakmai munkám során egyre inkább világossá vált, hogy a földi vízkészletek véges mennyisége és egyre romló minőségi állapota a fokozatosan növekvő vízigények mellett egyre komolyabb és bonyolultabb szakmai feladatokat és kihívásokat fogalmaz meg a szakemberek számára (Somlyódy 2002). Ebben a munkában a megbízható és megfelelően pontos hidrogeológiai modellezésnek óriási szerepe van, hiszen a felszín alatti vizek mennyiségi és minőségi állapotával kapcsolatos kérdések megválaszolásban alapvető és sokszor semmivel nem pótolható információkat ad a döntéshozók számára (Szűcs, Lénárt, Török, Horányiné Csiszár 2007; Virág, Szűcs, Lakatos és Mikó 2007). A hidrogeológiai modellezés eredményeit használhatjuk vízháztartási, vízgazdálkodási, vízellátási,

vízbányászati, környezetvédelmi, természetvédelmi, mezőgazdasági, bányászati, geotechnikai, kármentesítési és kárelhárítási problémák megoldásában. Az EU Víz-keretirányelv is számos olyan feladatot határoz meg például a vízgyűjtő-gazdálkodási vizsgálatokban, amelyek megoldásában a hidrogeológia modellezésnek is szerepet kell kapnia. A felszín alatti vizek egyre nagyobb szerepet kapnak az ivóvíz ellátásban és egyéb vízigények kielégítésében a világon mindenütt. Következésképpen még inkább nő a szerepe a vízbányászati célú modellezési eljárások és egyéb víztermelési módszerek fejlesztésének annak érdekében, hogy megfelelő mennyiségű és minőségű felszín alatti vizet lehessen szolgáltatni a különböző éghajlat változási tendenciákat és népesség növekedést prognosztizáló jövőben is.

Kutatási és gyakorlati munkáim során sokszor tapasztaltam azt is, hogy igen gyakran nem rendelkezünk elegendő számú mérési adattal a felszín alatti igen bonyolult heterogén és anizotrop földtani környezetben található vízkészleteinkről (Szűcs 2002). Ráadásul sokszor rontja a helyzetet az is, hogy a meglévő adatainkból nem nyerjük ki az összes információt, mert nem megfelelő adatfeldolgozási módszereket alkalmazunk (Szűcs 2007 a,b). Ez jelentős mértékben gyengítheti vagy bizonytalanná teheti a felszín alatti vízkészletekkel kapcsolatos döntési pozíciókat.

Mindezek tükrében a hidrogeológia területén végzett elméleti kutatásaim és gyakorlati munkáim során körvonalazódtak azok az alábbiakban felsorolt kutatási célkitűzések, amelyek megoldását nagyon fontosnak tartom a jelenben és a jövőben:

- Növelni kell a nagyon sok természeti és egyéb tényezőtől függő hidrogeológiai és vízbányászati modellek megbízhatóságát. Minőségellenőrzött modell paramétereket és modell szimulációkat szabad csak a felszín alatti vizekkel kapcsolatos szakmai döntések esetében felhasználni.
- Fejlesztteni kell és a gyakorló szakemberek számára jobban elérhetővé kell tenni az automatikus modell kalibrációs eljárásokat a hidrogeológiában.
- Be kell vezetni a mérnöki tudományokban egyre szélesebb körben használt globális optimalizációs módszereket a hidrogeológiai automatikus modell kalibrációs eljárásokban és egyéb optimalizációs feladatokban.

- Minél szélesebb körben kell használni az igen robusztus és rezisztens tulajdonságokkal rendelkező leggyakoribb értékek elvét a különböző típusú hidrogeológiai és hidrológiai adatok feldolgozásában.
- Új típusú regressziós eljárások kidolgozására van szükség a hidrogeológiában, illetve a földtudományokban az igen gyakran alkalmazott empirikus modell kapcsolatok pontosabbá való tételéhez.
- Ki kell dolgozni olyan értelmezési eljárásokat, amelyek képesek kezelni a legkülönbözőbb típusú hidrogeológiai adat, illetve hibaeloszlásokat. Mérési és egyéb adataink súlyozása hatékonyan segítheti a szakmai interpretációt.
- Többdimenziós mérési adatainkban is fel kell ismerni az ún. „outlier” vagy kieső adatokat. Ha ún. kieső adataink vannak, akkor szakmai választ kell találni arra, hogy mi az oka a trendtől eltérő jellegnek.
- Jelentősen növelni kell a geostatistikai eljárások alkalmazását a hidrogeológiai modellezésben, hiszen a vízföldtani paraméterek rendkívüli térbeli változékonyságot mutatnak a felszín alatti kőzetekben.
- Olyan matematikai és statisztikai módszereket kell alkalmazni a hidrogeológiai értelmezésben, hogy minél inkább kinyerjük és felhasználjuk a jelentős költségekkel szerzett terepi vagy laboratóriumi mérési adatainkban rejlő információkat.

## 2. Az alkalmazott vizsgálati módszerek

A hidrogeológia és a vízbányászati modellezés során koncepcionális leírását, illetve közelítését adjuk meg felszín alatti vizekkel kapcsolatos természeti jelenségeknek szakmai tudásunk és tapasztalatunk alapján (Szucs and Toth 2004). A modelljeink, amelyek képesek leírni a felszín alatti áramlási jelenségeket és az anyag-, illetve hő-transzport folyamatokat (Bobok 1987; Bobok 1993), matematikai egyenleteket alkalmaznak a vizsgált felszín alatti közegre vonatkozó feltételezésekkel. Az alkalmazott modellek használhatósága és megbízhatósága attól függ, hogy a figyelembe vett matematikai egyenleteink a hozzájuk tartozó közelítésekkel és feltételekkel mennyire közelítik a valóságos természeti folyamatokat.

A hidrogeológia egyik legfontosabb matematikai egyenletének tekinthető az 1856-ban publikált Darcy-egyenlet, amely a felszín alatti lamináris szivárgást jellemzi. Már a Darcy-egyenlet alkalmazása során is bizonyos elhanyagolásokat teszünk (Juhász 2002). Ha a felszín alatti komplex áramlásoknál figyelembe kívánjuk venni az áramlás térbeli irányultságát, időbeliségét és a közet inhomogenitásait, akkor a pontosabb hidrodinamikai számítások érdekében az általánosított Darcy-egyenletet, vagyis az általános szivárgási egyenletet kell használnunk. Potenciális áramlás esetében az általános szivárgási egyenlet alakja nyomás alatti rendszer esetében a következő (Szűcs és Tóth 2004), ha eltekintünk a forrásoktól és nyelőktől:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right), \text{ ahol} \quad (1)$$

$k_x, k_y, k_z$  – az x, y és z irányú szivárgási tényező [m/s],

$S_s$  – a fajlagos tárolási tényező [1/m],

$t$  – az idő [s],

$h$  – a hidraulikus emelkedési magasság [m].

Abban az esetben, ha a felszín alatti közetet homogénnek és izotrópnak tekintjük (vagyis  $k=k_x=k_y=k_z$ ), és a vizsgált réteg vastagsága  $b$  [m], akkor a fenti egyenlet az alábbiak szerint egyszerűsödhet:



$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t}, \text{ ahol} \quad (2)$$

$T$  – a vízzárló-képesség,  $k \cdot b$  [ $\text{m}^2/\text{s}$ ],

$S$  – a tárolási tényező,  $S_s \cdot b$  [-],

$t$  – az idő [s],

$h$  – a hidraulikus emelkedési magasság [m].

Ha a felszín alatti áramlás állandósult a nyomás alatti rétegben, vagyis az időbeli változástól eltekinthetünk, akkor az áramlási egyenlet a jól ismert Laplace-egyenletté egyszerűsödik (Tóth és Szűcs 2002).

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (3)$$

Nyíltükrű vízáradó vizsgálata esetében az általános szivárgási egyenletnek más típusú alakja lesz, hiszen az esetleges vízszint ( $h$ ) változások során változik a telített zóna vastagsága. Ebben az esetben az általános szivárgási egyenlet alakja a következő:

$$S_y \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (k_x h \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (k_y h \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (k_z h \frac{\partial h}{\partial z}), \text{ ahol} \quad (4)$$

$k_x, k_y, k_z$  – az  $x, y$  és  $z$  irányú szivárgási tényező [ $\text{m/s}$ ],

$S_y$  – a fajlagos vízhozam [-],

$t$  – az idő [s],

$h$  – a hidraulikus emelkedési magasság [m].

Abban az esetben, ha a nyíltükrű rendszert homogénnek és izotrópnak tekintjük (vagyis  $k=k_x=k_y=k_z$ ), akkor a fenti kifejezés a Boussinesq-egyenlet alakját veszi fel (Halász 1995; Szucs, Toth, Virag and Fesus 2005).

$$\frac{S_y}{k} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (h \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (h \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (h \frac{\partial h}{\partial z}) \quad (5)$$

A modellezés során alkalmazott matematikai egyenletek megoldása történhet analitikus eljárással vagy numerikus módszerekkel (Vágás 1968; Vágás 1974; Halász 1995). A gyakorlatban leginkább elterjedt számítógépes hidrodinamikai modellezés esetében az általánosított szivárgási egyenlet numerikus megoldása történik akár egy véges differenciás, akár egy véges elemes modellezési környezetben a kiindulási és peremfeltételek figyelembe vételével (Zákányi, Szűcs és Lénárt 2007; Zákányi és Szűcs 2007). A dolgozat keretében a felszín alatti vizek hidrodinamikai viselkedésével kapcsolatos modellezések a véges differenciás elven alapuló MODFLOW (Hill et al. 2000) eljárással történtek. Az USA Geológiai Szolgálatánál (USGS) kifejlesztett, és szabadon elérhető kódú MODFLOW eljárás a világon szinte mindenütt elfogadott és alkalmazott számítógépes program 3 dimenziós felszín alatti hidrodinamikai vizsgálatokra.

A hidrogeológiai és környezetvédelmi célú szimulációkban (Szűcs, Madarász, Zákányi 2007; Szucs, Madarasz, Toth, Nyari, Neduczka and Halmoczki 2007) gyakran alkalmazott transzport modellezés során az alábbi, a vizsgált szennyező anyag koncentrációjának térbeli és időbeli változását leíró differenciál egyenletet oldjuk meg numerikus-közelítéssel az alkalmazott modellrács minden cellájára (Szűcs, Tóth, Madarász, Faur and Virág 2005):

$$\frac{\partial(nC^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (nD_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (nv_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n, \quad (6)$$

ahol

- $n$  - a vizsgált felszín alatti közeg porozitása [-],
- $C^k$  - a k-ig komponens koncentrációja a felszín alatti vízben [mg/l],
- $t$  - idő [s],
- $x_{i,j}$  - távolság a vizsgált koordináta tengely mentén [m],
- $D_{i,j}$  - a hidrodinamikai diszperzió koefficiensek tenzora [ $m^2/s$ ],
- $v_i$  - áramlási sebesség a pórusokban [m/s],
- $q_s$  - egység-térfogathoz viszonyított forrás vagy nyelő hozam a vizsgált közegben [1/s],
- $C_s^k$  - a vizsgált komponens koncentrációja a forrásnál vagy nyelőnél [mg/l],

$\sum R_n$  - az esetleges kémiai reakciókat leíró tag [mg/l/s],

A jelenlegi hazai és nemzetközi hidrogeológiai modellezéssel kapcsolatos kutatások és fejlesztési irányok igen széleskörűek. Dr. Juhász József széleskörű munkássága során nagyon sokat tett azért, hogy a felszín alatti vizek áramlási viszonyait minél jobban leírassuk analitikus és numerikus eljárások, valamint modellek segítségével (Juhász 2002). Saját futtatható kúthidraulikai, áramlási és transzport szimulációs programok kidolgozásával hazánkban Dr. Székely Ferenc végzett és végez igen intenzív kutatási és fejlesztési tevékenységet a modellezési eljárások területén (Székely 1999; Székely 2006a; Székely 2006b). Dr. Halász Béla is elévülhetetlen érdemeket szerzett a hazai hidrogeológiai modellezési gyakorlat fejlődésében (Halász és Szőke 1992; Jeczkó és Halász 1986). A fiatalabb generációt képviselő Dr. Kovács Balázs az egyik legsokoldalúbb és legtapasztaltabb hazai hidrogeológiai modellezőként számtalan modellező szubrutin fejlesztésében és kidolgozásában vett részt (Kovács 2004; Kovács és Szanyi 2005). Számos nagytekintélyű kutató mellett Csepregi András (Csepregi 2007), Dankó Gyula (Dankó 2005), Gondárné Sőregi Katalin (Gondárné 2005), Mező Gyula (Mező 2005), Simonffy Zoltán (Simonffy 1998), Dr. Szanyi János (Kovács és Szanyi 2005, Marton és Szanyi 2000), Dr. Szőcs Teodóra (Szőcs 2005), Dr. Viszok János (Gáspár és Viszok 2004), Dr. Völgyesi István (Völgyesi 1993, Völgyesi 2005) és Tóth György (Tóth Gy. et al 2003) szakmai munkássága is nagyon sokat segített abban, hogy a hazai hidrogeológiai modellezés elmélete és gyakorlata a mai igen magas, nemzetközileg is elismert szintre emelkedjen. A magam részéről kutatási tevékenységem során széleskörű matematikai és statisztikai eszköztárat alkalmaztam annak érdekében, hogy növelni lehessen a hidrogeológiai és vízbányászati modellek segítségével készített szimulációk elméleti és gyakorlati használhatóságát és megbízhatóságát. Emellett mindig is nyitott voltam a hidrogeológia tudományában és gyakorlatában a hazai és nemzetközi szinten is megjelenő új és korszerű eljárások megismerésére és saját munkáimban történő adaptációjára.

Kutatómunkám eredményeként a hidrogeológiai alkalmazásokba is bevezetett leggyakoribb érték módszerét (angolul „**Most Frequent Value**”, MFV eljárás) a Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén dolgozták ki (Steiner (ed) 1991, 1997). Dr. Steiner Ferenc professzor úr által vezetett kutatócsoport dolgozta ki az elméleti hátterét

ennek az igen robusztus és hatékony geostatistikai eljárásnak mintegy 30 éve. Ma már az eljárást hazánkban széles körben sikerrel alkalmazzák különböző földtudományi problémák megoldására. A leggyakoribb érték módszer elve az információ veszteség (I-divergencia) minimalizálásából ered (Hajagos, Steiner and Szűcs 1999). Az MFV módszernek jelentős előnyei vannak a „maximum likelihood” elvből kiinduló klasszikus statisztikai módszerekkel szemben. Az MFV algoritmus és a globális optimalizáció együttes alkalmazása egy hatékony új eszköz lehet a hidrogeológia, illetve a vízföldtani modellezés inverz feladatainak megoldásában (Szűcs, Civan and Virág 2006). A javasolt új eljárás alkalmazhatósága és előnyei számos szintetikus és valós adatrendszer felhasználásán keresztül lett bemutatva (Szűcs, Madarász and Zákányi 2007).

A különböző típusú vízföldtani modellezés egyik fő célja egy olyan jól működő modell felállítása, ami a hidrogeológiai és egyéb típusú megfigyeléseket kellő mértékben visszaadja. Matematikai megközelítésből optimalizációt végzünk, hogy megtaláljuk a megoldást (Lee 1999). Ez alapján a hidrogeológiai modell paramétereinek az optimális értékét határozzuk meg az inverz vagy automatikus kalibrációs módszerrel. Az inverz folyamat során egy speciális hiba függvényt, vagy más néven egy célfüggvényt minimalizálunk, ami a különbséget vagy az eltérést jellemzi a mért és a modellparaméterekkel számított adatok között. Földtudományi alkalmazásokban a célfüggvénynek általában számos minimuma és maximuma van a többdimenziós paraméterterben (Szűcs és Tóth 2005). A klasszikus, ún. lokális minimumhely kereső algoritmusok sokszor elakadnak valamelyik lokális minimumban, ahelyett hogy megtalálnák a globális minimumot. (Sen and Stoffa 1995). A globális optimalizációs módszerek alkalmazása éppen ezért lehetne széleskörű a különböző hidrogeológiai problémák megoldásában. A hazai előzményeket illetően meg kell említeni, hogy felszíni vizeket érintő vízgazdálkodási problémák kezelésére Pintér és Szabó (1986) mutatatta be a globális optimalizálás alkalmazásának különböző lehetőségeit.

Legtöbb esetben a globális optimalizációs módszerek Monte Carlo becslésen alapulnak (Szűcs, Lénárt and Tóth 2005). A genetikus algoritmus mellett (GA), a Simulated Annealing (SA) globális optimalizáció az egyik legelterjedtebben alkalmazott minimalizálási eljárás a földtudományi és a mérnöki gyakorlatban. Bár hosszabb számítógépes futási időkre kell számítanunk, az SA algoritmus könnyen programozható, és ma már még az ismeretlen paraméterek nagy száma esetén is kellően gyors.

A modell paramétereknek bizonyos értékeket adva a számított vagy teoretikusan mért adatokat származtatjuk. Ez képezi a direkt problémát. A direkt feladat megoldása szolgáltatja a matematikai kapcsolatot a modell paraméterek és a számított vagy szimulált adatok között. A természeti jelenségeket jól közelítő, pontos direkt feladat megoldás alapvető fontosságú egy hatékony inverz, illetve kalibrációs algoritmushoz. A numerikus módszerek alkalmazása nagy szerepet kap a kívánt pontosságú hidrogeológiai vagy vízbányászati direkt feladat számításában (Lénárt, Madarász, Szabó, Szűcs et. al 2003).

A direkt és inverz feladatok mellett, az alkalmazott statisztikai vagy geostatisztikai elv szintén kulcsfontosságú a sikeres modellezésben, mivel az optimalizálandó célfüggvény különböző statisztikai normákon alapul. Sajnos a régi dogma még mindig erősen tarja magát még a gyakorló szakemberek között is (Szűcs 1997; Szucs and Nyari 2005), miszerint a mérési hibák közelítőleg normál (Gauss) eloszlásúak (Huber 1981). Ennek köszönhető, hogy a maximum likelihood becslésen alapuló legkisebb négyzetek elvének alkalmazása a földtudományokban is igen széleskörűen elterjedt. Ezeknek a klasszikus algoritmusoknak a hatékonysága azonban kérdéses, amikor a vizsgált felszín alatti rendszerben a hiba nem Gauss eloszlású (Lénárt, Szűcs, Tóth, Faur, Madarasz and Virag 2005).

A hidrogeológia vizsgálatokban, illetve a modellezési feladatok előkészítésében rendkívül nagy a szerepe a regressziós vagy kiegyenlítő eljárásoknak. Vízföldtani problémák esetében nagyon sokszor alkalmazunk regressziós számításokon alapuló empirikus vagy félempirikus összefüggéseket (Szucs, Horne and Ritter 2007). A többváltozós lineáris és nem lineáris kiegyenlítési eljárások matematikai háttere sok tekintetben hasonlít a hidrogeológiai modellezés során alkalmazott automatikus kalibrációs eljárások elméleti alapjaihoz. Matematikai szempontból sok esetben nagyon hasonló mátrix műveleteket kell végrehajtanunk az adott szélsőérték feladat során. Például az alábbi  $(a_j)$  regressziós koefficienseket számító mátrix egyenlet teljesen hasonló alakban előfordul a hidrogeológiai kalibrációs eljárásoknál is.

$$a = (X'X)^{-1}X'Y \quad (7)$$

A különböző típusú vizsgálatok során viszont az is világossá vált, hogy a regressziós eljárások esetében szükség van új módszerek kidolgozására is, ahol a vizsgált földtani és vízföldtani változók közötti természeti kapcsolatok kvantitatív leírása nem találghatáson, illetve szubjektív szakmai megérzésen alapul (Lénárt és Szűcs 2007; Szűcs, Madarász és Lénárt 2007; Szucs, Madarász, Nyari, Scholtz, Neducza and Halmoczki 2006).

Nem hanyagolható el a geostatisztikai eljárások jelentősége sem a hidrogeológiai és vízbányászati modellezési eljárások fejlesztésében (Szűcs és Virág 2005; Toth and Szucs 2006). A hidrogeológiai paraméterek rendkívüli térbeli változékonyságot mutatnak a felszín alatt, legyen szó akár a szivárgási tényezőről, vagy a mechanikai diszperziós tényezőről (Nyari, Neducza, Szucs, Madarász and Halmoczki 2007; Szabó 1999). A vizsgált paraméterek térbeli változékonyságának kezelése érdekében mindenféleképpen szükség van a geostatisztikai eljárások széleskörű alkalmazására (Caers 2005). Csak így van lehetőség arra, hogy feltárjuk a vizsgált paraméterek változékonyságának földtani és egyéb típusú okait (Virág, Szűcs és Lakatos 2005).

### 3. Új tudományos eredmények és megállapítások

A Ph.D. tudományos fokozat megszerzését (1996) követő mintegy 12 év kutatási eredményeit és főbb megállapításait a következő hat alfejezetbe csoportosítottam.

#### 3.1. Inverziós feladat a hidrogeológiai és vízbányászati modellezésben

A vízkészlet-gazdálkodási számításokban, vízbázis-védelmi programokban vagy számos egyéb területeken alkalmazott hidrogeológiai inverz feladat során egy szintetikus adathalmazt állítunk elő az előzetesen felvett modellparaméterek segítségével. Az így számított adatokat hasonlítjuk össze a mért adatokkal. Amennyiben az illeszkedés mértékét elfogadhatónak találjuk, az aktuális modellparamétereket megoldásként fogadjuk el (Szűcs, Lénárt, Kovács és Horányiné Csiszár 2006). Ellenkező esetben, a modell paramétereket módosítjuk, hogy egy új számított adathalmazt állítsunk elő. Ezt követően az illesztést újra végrehajtjuk. Az egész procedura így folytatódik, míg a mért és számított adatok közötti illeszkedés kielégítő nem lesz (Carrera et al. 2005). Ilyen szempontból tehát az inverz vagy inverziós feladat optimalizálást jelent. Az optimalizációban szereplő célfüggvény értéke az alkalmazott inverz módszer megbízhatóságáról és pontosságáról szolgáltat információt (Zámbó 1966). A legegyszerűbb inverz számításoknál lineáris kapcsolat áll fenn a mért adatok és modellparaméterek között. Sajnos ezek az egyszerű inverz problémák nagyon ritkák a hidrogeológiában, illetve a hidrodinamikai és transzport modellezés során (Halász és Szőke 1992; Szűcs, Madarász, Illés, Ulaga, Béresné és Lossos 2006).

Az esetek döntő többségében a hidrogeológiai modellezésben diszkrét, mérésekkel meghatározott adatokat használunk (Szűcs, Lénárt, Somody and Toth 2006). A legegyszerűbb mód a mért adatainkat egy oszlopvektorba helyezni (Sen and Stoffa 1995):

$$d_{mért} = [d_1, d_2, d_3, \dots, d_{ND}]^T, \quad (8)$$

ahol  $ND$  a rendelkezésre álló adatok száma,  $T$  felső index pedig a mátrix transzponált műveletet jelenti. Hasonlóan a vizsgálat tárgyát képző modell paramétereit is egy oszlopvektorba tehetjük:

$$m = [m_1, m_2, m_3, \dots, m_{NM}]^T, \quad (9)$$

ahol  $NM$  a modellparaméterek számát jelenti. A számított (vagy ún. szimulált mérési) adatokat egy  $g$  operátor függvény segítségével a direkt feladat megoldásaként kapjuk:

$$d_{cal} = g(m) \quad (10)$$

A hidrogeológia és fluidumbányászat területén a direkt feladat megoldása az esetek zömében nem közelíthető lineáris egyenletekkel. A cél az, hogy minimalizáljuk a mért ( $d_{mért}$ ) és a számított adataink ( $d_{cal}$ ) közötti különbséget. A különbség vagy eltérés jellemzésére szolgáló hiba vektort ( $e$ ) így definiálhatjuk:

$$e = d_{mért} - d_{cal} = d_{mért} - g(m). \quad (11)$$

Az adatrendszerek közötti különbség, a hiba kvantitatív definiálására ún. statisztikai normákat használhatunk. Az egyik legelterjedtebb általános hibafüggvény az  $L_p$  – norma (Menke, 1984), amely a következőképpen definiálható:

$$\|e\|_p = \left[ \sum_{i=1}^{ND} |e_i|^p \right]^{1/p}. \quad (12)$$

Az  $L_p$  –norma leginkább alkalmazott és ismert változata a legkisebb négyzetek elvére épülő  $L_2$ -norma (Lines and Treitel, 1984):

$$\|e\|_2 = \left[ \sum_{i=1}^{ND} |e_i|^2 \right]^{1/2}, \quad (13)$$

amelyet vektoros formában is kifejezhetünk:



$$L_2 \text{ norma: } \|e\|_2 = \left[ (d_{mért} - g(m))^T (d_{mért} - g(m)) \right]^{1/2}. \quad (14)$$

Ha az  $L_2$ -norma értékét elosztjuk az adataink számával (ND), akkor a szórás ( $\sigma$ ) definíciójához juthatunk, amelyet nagyon sok esetben RMS („root-mean square”) hibaként is jelölnek (Isaaks et al., 1989, Dobróka et al., 1991).

A súlyozott  $L_2$ -norma alkalmazása akkor jöhet szóba, ha méréseinkkel kapcsolatban további információkkal rendelkezünk. A gyakorlatban azonban csak igen ritkán rendelkezünk olyan többlet információkkal, amelyek alapján adatainkat megbízhatóan súlyozhatnánk. Tisztában kell lenni azzal a ténnyel, hogy az adott inverziós feladatban alkalmazott norma nagymértékben befolyásolja a paraméterbecslés megbízhatóságát és pontosságát. Mivel a mért adataink a legkülönbözőbb valószínűségi eloszlásúak is lehetnek, s nagyon gyakran ún. kieső adatokra („outlier”) is számítanunk kell, ezért az  $L_2$ -norma alkalmazása a földtudományok területén jelentős hátrányokkal járhat (Sun, 1994). Ezért van szükségünk ún. robusztus és rezisztens statisztikai eljárásokra, amelyek jól tudják a vizsgált adatrendszert kezelni függetlenül az adateloszlás típusától, s a kieső adatok sem torzítják el a számításokat (Szucs 2007 a). Természetesen az is nagyon fontos, hogy egy több dimenziós adatrendszer esetében felismerjük, hogy melyek a kieső adatok. A szakember ekkor tud tovább lépni annak érdekében, hogy megállapítsa a kieső adatok okát, amely lehet egyszerű eliminálandó mérési hiba is, de lehet nagyon fontos földtani vagy vízföldtani információ is. Robusztusság és rezisztencia szempontjából már az  $L_1$ -norma alkalmazása is jelentős előnyökkel járhat a hagyományos legkisebb négyzetes eljárás mellett. Azonban a leggyakoribb értékek elvére épülő  $P_k$ -norma (Steiner, 1991, 1997) még az  $L_1$ -normánál is kedvezőbb tulajdonsággal rendelkezik földtudományi adatrendszerek kezelése esetén. A  $P_k$ -norma a következőképpen definiálható (Szucs and Toth 2007):

$$P_k = \varepsilon \left[ \prod_{i=1}^{ND} \left( 1 + \frac{(d_i^{mért} - d_i^{cal})^2}{(k\varepsilon)^2} \right) \right]^{\frac{1}{2ND}}, \quad (15)$$

ahol  $\varepsilon$  a skálaparaméter vagy dihézió, s amelynek a jelentését a későbbiekben pontosítjuk.

A modellezés során viszonylag könnyű dolga van a szakembernek, ha az adatok és a modell paraméterek között lineáris kapcsolat van:

$$d_{cal} = Gm, \quad (16)$$

ahol  $G$  a lineáris modell operátort jelenti. A hidrogeológia vagy a vízbányászat területén azonban ilyen egyszerű modell kapcsolatok viszonylag ritkán fordulnak elő.

Amennyiben a kapcsolat a modellparaméterek és a számított adatok között nem lineáris, a Taylor sorfejtésen alapuló linearizálási módszerek vezethetők be a megoldás egyszerűsítésére. A Taylor-sor másod és magasabb rendű tagjait elhanyagolva a következő egyenletek származtathatók.

$$d_{mért} = g(m_0 + \Delta m) \quad \text{és} \quad d_{cal} = g(m_0) \quad (17)$$

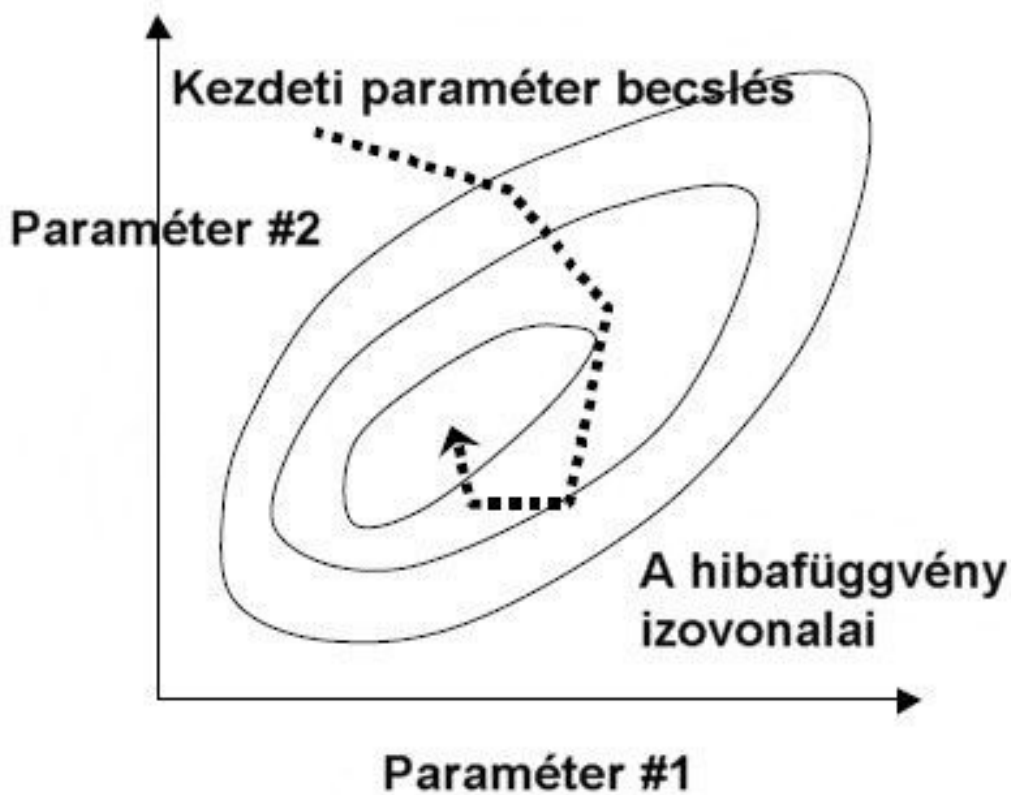
$$g(m_0 + \Delta m) = g(m_0) + \left. \frac{\partial g(m_0)}{\partial m} \right|_{m=m_0} \Delta m \quad (18)$$

$$d_{mért} = d_{cal} + \left. \frac{\partial g(m_0)}{\partial m} \right|_{m=m_0} \Delta m \quad (19)$$

$$\Delta d = G_0 \Delta m, \text{ ahol } \Delta d = d_{mért} - d_{cal}, \text{ és } G_0 \text{ az érzékenységi mátrix.} \quad (20)$$

Az érzékenységi mátrix magában foglalja a számított adatok modellparaméterek szerinti parciális deriváltjait. Fontos kérdés annak tisztázása, hogy vajon egyedi megoldás létezik-e vagy sem (egzisztencia), és hogy a megoldás stabilnak tekinthető-e vagy nem (stabilitás és konvergencia). Az  $L_2$  norma esetében a modellparaméterekre a megoldás a következő. A modellezési gyakorlatban a túlhatározott rendszerek alkalmazása a leggyakoribb (Sen and Stoffa 1995). Ebben az esetben a mért adatok száma (ND) nagyobb vagy sokkal nagyobb, mint a modellparaméterek száma (NM). Így a (20) egyenletből kiindulva az alábbi kifejezés nyerhető az  $m_0$  paramétervektor módosítására (lásd 1. ábra).

$$\Delta m = [G^T G]^{-1} G^T \Delta d \quad (21)$$



**1. ábra**

A kezdeti modellparaméter vektor javítása iterációs módszerrel a hibafüggvény minimuma felé haladva.

A földtudományi és a fluidumbányászati mérési adatok majdnem minden esetben mérési és egyéb hibákat is tartalmaznak. Az inverzióval nyert modellparaméterek jellemzésére bevezethető a következő kovariancia mátrix (Szucs and Madarasz 2006).

$$[\text{cov } \Delta m] = \sigma_d^2 [G^T G]^{-1} \quad (22)$$

Ha a vizsgált modell paraméterei teljesen függetlenek lennének egymástól, akkor csak a kovariancia mátrix átlójában szerepelnének értékek. A főátlón kívüli elemek a paraméterek közötti korreláció erősségére utalnak. Gyakran előfordul, hogy a mért adatok egy diagonális  $W$  mátrixszal súlyozhatók valamilyen egyéb többletinformáció

alapján. Ebben az esetben a súlyozott legkisebb négyzetek elvét alkalmazva a modellparamétereket és a kovariancia mátrixot az alábbi egyenletek szerint számíthatjuk.

$$\Delta m = [G^T W G]^{-1} G^T W d \quad (23)$$

$$[\text{cov } \Delta m] = \sigma_d^2 [G^T W G]^{-1} \quad (24)$$

A modellező programrendszerekben leginkább elterjedt Marquardt–Levenberg algoritmust alkalmazva, az (21) egyenlet iterációs megoldása az alábbi módon módosítható (Marquardt 1970):

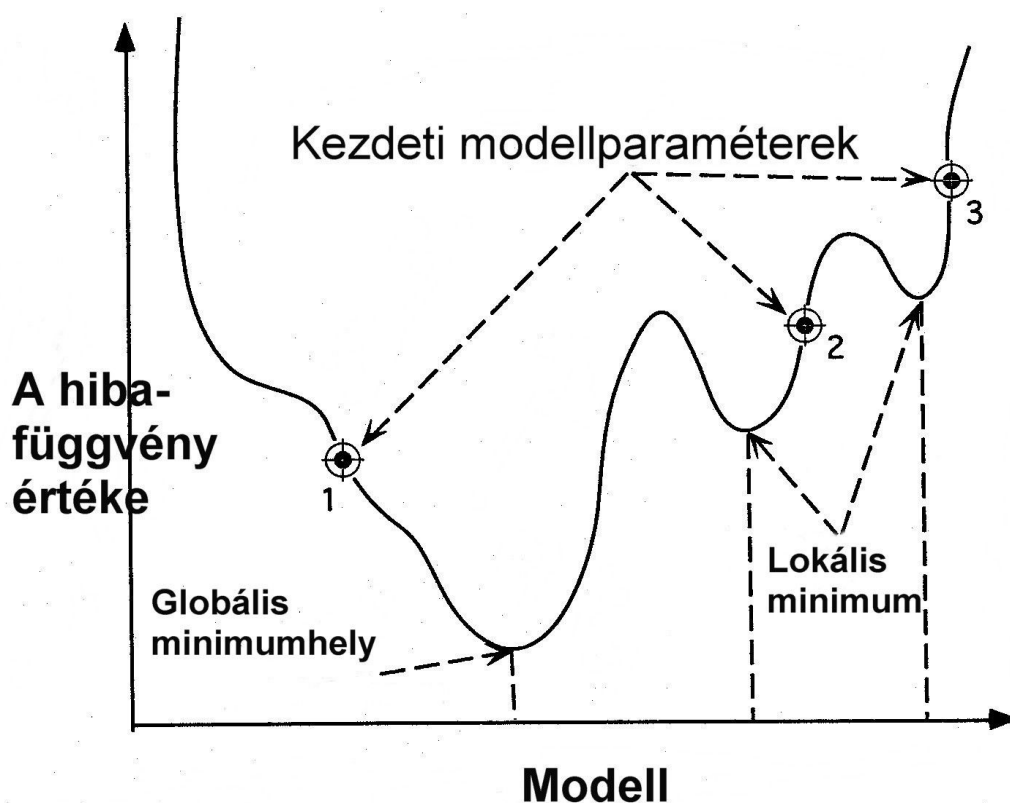
$$\Delta m = [G^T W G + \alpha I]^{-1} G^T W \Delta d, \quad (25)$$

ahol  $\alpha$  az ún. Marquardt paraméter, amely értéke fokozatosan tart nullához az iteráció folyamat során. Ezért a Marquardt–Levenberg módszer, amelyet gyakran Ridge-regresszióknak is neveznek, az iterációk kezdetén tulajdonképpen gradiens módszerként működik a többváltozós hibafüggvény felületén. Ezt követően fordul a Gauss-Newton módszerbe az optimális megoldás közelében. Annak ellenére, hogy a Marquardt–Levenberg algoritmus nagyobb stabilitást biztosít, a hatékonysága még mindig erősen függ az induló vagy az ún. startmodell paramétereinek kezdeti értékétől. Amennyiben a vizsgált hidrogeológiai vagy vízbányászati célfüggvénynek több lokális minimuma van, a fentebb említett lokális minimumhely kereső algoritmusok nem a globális minimumot szolgáltatják megoldásként “nem megfelelő” startmodell esetén (lásd 2. ábra).

E fontos tény egyszerű bizonyításaként a következő egyszerű minimumhely kereső próbát végeztük el (Szűcs, Tóth és Virág 2006). Egy kétdimenziós szinusz kardinális hibafüggvényt definiáltunk a következőképpen (lásd 3. ábra):

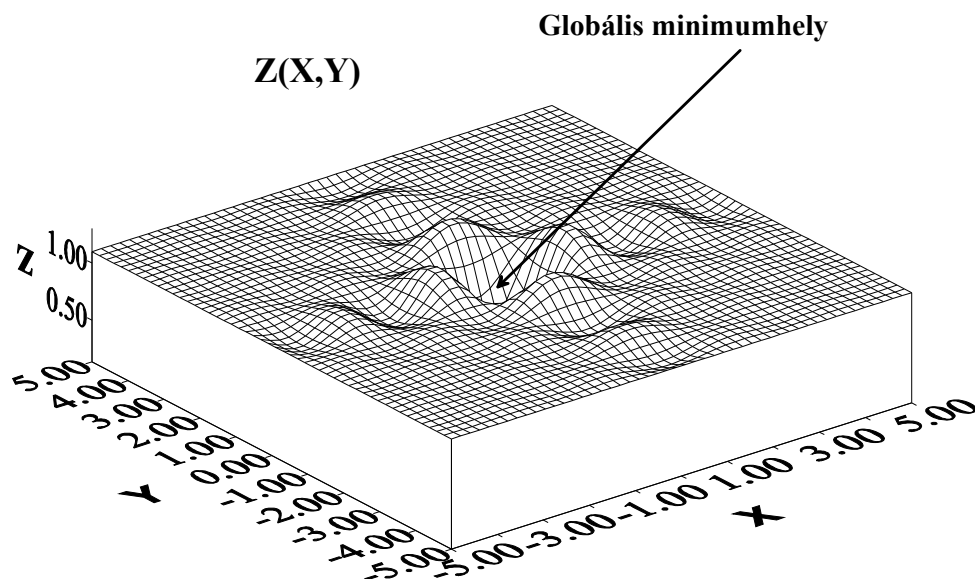
$$z(x, y) = 1.1 - \sin c(x) \sin c(y) \quad (26)$$

E speciális függvény által leírt felületnek számos lokális és csak egyetlen globális minimuma van az  $x = 0, y = 0$  helyen (3. ábra). Ha a Levenberg-Marquardt algoritmust az  $x = 3.5$  és  $y = 0$  pontból indítjuk, az  $x = 3.53$  és  $y = 0$  helyen található lokális minimumot kapjuk megoldásként. A kísérletet többször megismételtük különböző kezdeti értékekkel, hogy leellenőrizzük a globális minimumkeresés hatékonyságát. A globális minimumot a Levenberg-Marquardt módszerrel csak akkor értük el, ha a kezdőpont a globális minimum körüli „völgy” oldalain belül volt. A későbbiekben ismertetett Simulated Annealing algoritmus könnyen megoldja ezt a feladatot anélkül, hogy elakadna bármelyik lokális minimumban.



2. ábra

A hagyományos optimalizációs algoritmusok hatékony működése nagymértékben függ modellparaméterek kezdeti értékeitől, az ún. start modelltől (Sen és Stoffa 1995).



**3. ábra**

Kétdimenziós felület számos lokális és egy globális minimummal az  $x = 0$   $y = 0$  helyen (Szucs, Civan and Virag 2006).

### **3.2. Globális optimalizáció a hidrogeológiában**

A genetikus algoritmus (GA) mellett, a „Simulated Annealing” (SA) vagy a „szimulált hűtés” módszerét széles körben alkalmazzák a globális minimumhely megtalálására a különböző mérnöki és természettudományi optimalizációs problémákban (Sen and Stoffa 1995). Kirkpatrick és társai (1983) megmutatták, hogy a Metropolis és társai (1953) által ajánlott fém olvadékok viselkedésének analógiájára felépített matematikai algoritmus olyan optimalizációs problémákra használható, ahol a minimalizálandó célfüggvény a fémek energiaállapotának felel meg, a folyamat előre haladását irányító kontroll paraméter pedig a hőmérsékletnek. A nagy energiával és termikus mobilitással rendelkező atomokból álló fém olvadék hűtési folyamata során az atomok fokozatosan vesztenek energiájukból, s megindul a kristályosodás fogalma (Dobróka 2001). Ha a hűtést nagyon lassan végezzük, az atomok a tökéletes kristályszerkezetet veszik fel, amelyben a rendszer ún. szabadenergiája minimális. E természeti folyamatból kiindulva napjainkban számos újabb módosított módszere létezik a klasszikus Metropolis optimalizációs algoritmusnak. Ezek közül az Ingber (1989) által bevezetett „Very Fast

Simulated Annealing” (VFSA), vagy magyarul a nagyon gyors szimulált hűtés módszer tűnik a leggyorsabbnak és leghatékonyabbnak a sokváltozós hidrogeológiai problémák esetében (Szűcs, Madarász, Lénárt és Ilyés 2006).

A klasszikus Metropolis algoritmus előállítása egy adott hidrogeológiai vagy vízbányászati problémára viszonylag egyszerű. A kezdeti modellparaméter vektort jelöljük  $m_i$ -vel, és ekkor a célfüggvény (vagy hibanorma)  $E(m_i)$ -ként adható meg. Ezt követően pedig egy új paraméter vektor ( $m_j$ ) és a hozzá tartozó célfüggvény  $E(m_j)$  generálható. A célfüggvény értékében történő változás a következőképpen írható fel:

$$m_j = m_i + \Delta m_i \quad (27)$$

$$\Delta E_{ij} = E(m_j) - E(m_i) \quad (28)$$

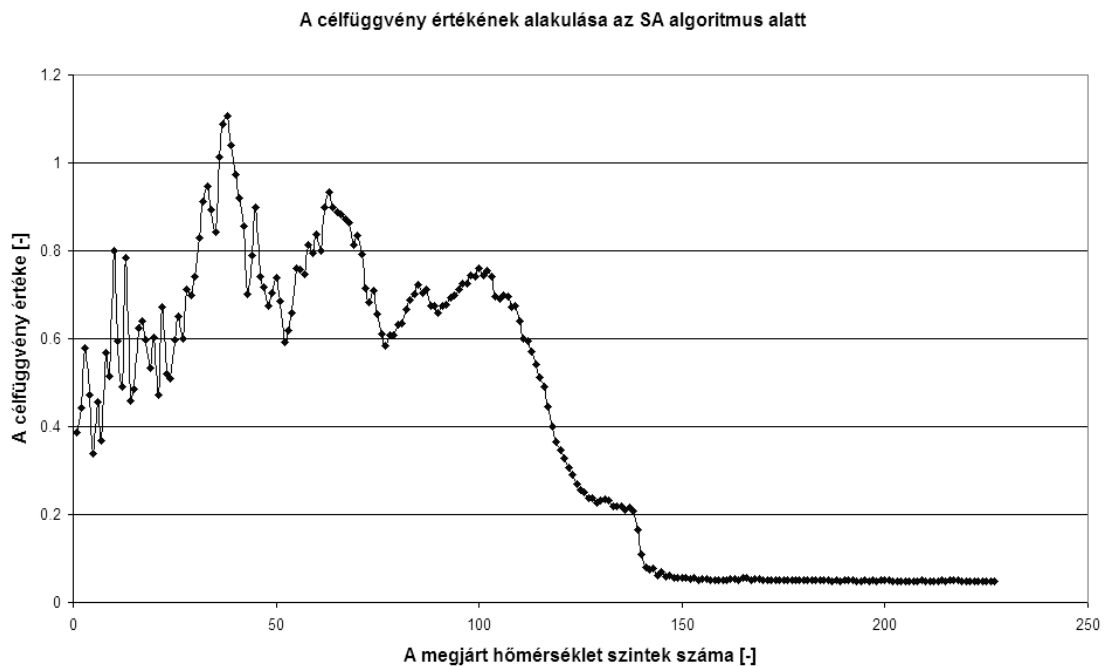
Ha  $\Delta E_{ij} \leq 0$ , az új  $m_j$  paraméter vektort minden esetben elfogadjuk. Ezzel szemben, ha  $\Delta E_{ij} > 0$ , az  $m_j$  paraméter vektor elfogadásának valószínűségét a következő egyenlet formájában adjuk meg:

$$P = \exp\left(-\frac{\Delta E_{ij}}{T}\right), \quad (29)$$

ahol  $T$  az optimalizáció során alkalmazott hőmérsékletnek felel meg. Ezt az elfogadási feltételt Metropolis kritériumnak nevezzük. Ez a kritérium biztosítja annak a lehetőségét, hogy az algoritmus ne akadjon el a lokális minimum helyeken. A hőmérsékletet az előre felvett hűtési ütemnek megfelelően követve csökkentjük. A jól megválasztott és megfelelő hűtési ütem garantálja a módszer konvergens viselkedését (lásd 4. ábra).

A hűtési ütem tekintetében azonban a hőmérséklet csökkentésének helyes megválasztása nem könnyű feladat. Számos szerző bemutatta, hogy a hőmérséklet túl gyors csökkentése a célfüggvény lokális minimumhelyében való elakadást eredményezheti. Egy ajánlott választás, ha az  $n$ -edik iterációban a hőmérséklet arányos

az  $1/\ln(n+1)$  kifejezés értékével (Szűcs és Civan 1996). A Metropolis algoritmus könnyen programozható pseudo FORTRAN kódja tekinthető meg az alábbiakban.



#### 4. ábra

A célfüggvény értékének alakulása egy jól működő és konvergáló SA algoritmus esetében rezervoármechanikai, illetve közetfizikai paraméterek meghatározása során (Szucs and Civan 1996).

A Metropolis algoritmus pseudo FORTRAN kódja (Sen és Stoffa 1995).

- 1) Select an initial state  $m$
- 2) Select an initial temperature  $T > 0$
- 3) Set the temperature change counter as  $t = 0$
- 4) Set the repetition counter as  $r = 0$
- 5) Generate the state  $m'$ , as a neighbor of  $m$
- 6) Calculate  $\delta = E(m') - E(m)$
- 7) If  $\delta < 0$  then set  $m = m'$   
    else if random  $(0,1) < \exp(-\delta/T)$  then  $m = m'$
- 8) Set  $r = r + 1$
- 9) Goto 5 until  $r = R(t)$



- 10) Set  $t = t + 1$
- 11) Set  $T = T(t)$
- 12) Goto 4 until a suitable stopping criterion is satisfied.

Ingber (1989) módosította a Metropolis algoritmust, és bevezette a „Very Fast Simulated Annealing” (VFSA) módszert, amely sokkal rövidebb számítógépi futási időt igényel sokparaméteres modellek esetén. Ebben az esetben az alapelv az, hogy minden egyes modellparaméternek különböző nagyságú tartománya van, amelyek különböző mértékben befolyásolják a hibafüggvényt. Az  $i$ -edik modellparaméter ( $m_i$ ) értéke a  $k$ -adik hűtési vagy iterációs lépésben az alábbiak szerint változhat.

$$m_i^{\min} \leq m_i^k \leq m_i^{\max} \quad (30)$$

A  $k+1$ -edik iterációban az  $m_i$  modell paraméter értékét véletlen szám generátor ( $U[0,1]$ ) segítségével állíthatjuk elő:

$$m_i^{k+1} = m_i^k + y_i (m_i^{\max} - m_i^{\min}), \quad \text{ahol} \quad (31)$$

$$y_i = \text{sgn}(u_i - \frac{1}{2}) T_i \left[ \left(1 + \frac{1}{T_i}\right)^{|2u_i - 1|} - 1 \right]. \quad (32)$$

Ingber megmutatta, hogy jó hatásfok szempontjából a következő hőmérséklet-csökkentési séma javasolható:

$$T_i(k) = T_{0i} \exp(-c_i k^{\frac{1}{NM}}). \quad (33)$$

A (33) egyenletben  $NM$  a modellparaméterek számát jelöli. A hatékony és gyorsan konvergáló VFSA módszer is könnyen programozható a különböző hidrogeológiai, fluidumbányászati inverziós és szélsőérték problémák esetében. Ma már egyre kevésbé jelenthet gátat a számítógépi futási idő, amely korábban a globális optimalizációs algoritmusok gyakorlatban is történő elterjedését akadályozták (Drobot, Jianu, Sirbu, Minciuna, Filip, Brouyere, Dassargues, Szucs, Karsai, Tóth, Faur, Virág 2006). A

VFSA algoritmus viszonylagos egyszerűségét mutatja be az alábbi pseudo FORTRAN kód.

A VFSA algoritmus pseudo FORTRAN kódja (Sen és Stoffa 1995).

- 1) Start at a random location  $\mathbf{m}$  with  $E(\mathbf{m})$
- 2) Loop over temperature ( $T$ )
- 3) Loop over number of random moves/temperature
- 4) Loop over model parameters  $i = 1, 2, \dots, NM$
- 5)  $u_i \in U[0,1]$
- 6) 
$$y_i = \text{sgn}(u_i - \frac{1}{2}) T_i^{\text{mod}} \left[ \left(1 + \frac{1}{T_i^{\text{mod}}}\right)^{|2u_i - 1|} - 1 \right]$$
- 7) 
$$m_i^{\text{new}} = m_i^{\text{old}} + y_i (m_i^{\text{max}} - m_i^{\text{min}})$$
- 8) 
$$m_i^{\text{min}} \leq m_i^{\text{new}} \leq m_i^{\text{max}}$$
- 9) End loop
- 10) Now there is a new model  $\mathbf{m}^{\text{new}}$
- 11)  $\Delta E = E(\mathbf{m}^{\text{new}}) - E(\mathbf{m})$
- 12)  $P = \exp(-\Delta E / T)$
- 13) If  $\Delta E \leq 0$ , then
- 14)  $\mathbf{m} = \mathbf{m}^{\text{new}}$
- 15)  $E(\mathbf{m}) = E(\mathbf{m}^{\text{new}})$
- 16) End if
- 17) If  $\Delta E > 0$ , then
- 18) Draw a random number  $r = U[0,1]$
- 19) If  $P > r$ , then
- 20)  $\mathbf{m} = \mathbf{m}^{\text{new}}$
- 21)  $E(\mathbf{m}) = E(\mathbf{m}^{\text{new}})$
- 22) End if
- 23) End if
- 24) End loop
- 25) End loop

### 3.3. A leggyakoribb érték (MFV) módszerének bevezetése a hidrogeológiai és vízbányászati modellfeladatok megoldásában

Az optimalizálási módszeren kívül, a cél- vagy hibafüggvénynek szintén nagy szerepe van a hidrogeológiai inverzió vagy a hidrodinamikai és transzport, illetve a fluidumbányászati modellezés során a modellparaméterek megbízható számításában. Az alkalmazott statisztikai norma meghatározza az optimalizálási eljárás hatékonyságát egy adott hibaeloszlásnál. Számos korábbi földtudományi alkalmazáson és példán keresztül bizonyítást nyert (Steiner 1972, Steiner 1988, Ferenczy et al. 1990, Steiner és Hajagos 1994, Szűcs és Civan 1996), hogy a leggyakoribb érték elvének (MFV) alkalmazása számos előnyt nyújthat a hidrogeológiában és egyéb földtudományi területeken szemben a legkisebb négyzetes vagy egyéb hagyományos statisztikai módszerekkel. Ha a fentebb említett módon a mért és számított adatvektorok rendelkezésre állnak, akkor a különbség vektor elemeit ( $X_i$ ) a következőképpen definiálhatjuk:

$$X_i = d_i^{mert} - d_i^{cal} \quad (34)$$

Ezek után például egy általános hidrodinamikai modellezési probléma optimalizációja a következőképpen definiálható: a mért és számított vízszintek (vízhozamok, stb.) különbségének normája minimum kell, hogy legyen. A legtöbb esetben a legkisebb négyzetes elvét alkalmazzák. A klasszikus, legkisebb négyzetes statisztika, amely a normál eloszlás elvén alapul, matematikailag könnyen definiálható az  $X_i$  különbségvektorral: az a modell paraméter vektor a legjobb, amely teljesíti az alábbi feltételt:

$$\sum_{i=1}^{ND} X_i^2 = \text{minimum}. \quad (35)$$

Habár ez a minimum feltétel igen elterjedt, számos hátránya van a hatékonyság és rezisztencia vonatkozásában, hiszen a kieső adatokra igen érzékenyen reagál, és arra is, hogy milyen sűrűségfüggvény típussal közelíthető az  $X_i$  értékek eloszlása. Steiner (1965) vezette be a maximum reciprokok elvét a Miskolci Egyetemen. Ezen elv esetén az a modell paraméter vektor tekinthető a legjobbnak, amely az alábbi feltételt teljesíti:

$$\sum_{i=1}^{ND} \frac{1}{X_i^2 + S^2} = \text{maximum}, \quad (36)$$

ahol az  $S$  skála paraméter jellemzi a mérési, illetve egyéb modell hibát. Ha összevetjük a fentebb definiált elveket, akkor nyilvánvaló, hogy a (35) egyenlet a kieső adatokra igen érzékeny. Ha például egy, vagy több  $X_i$  nagy mérési hibával terhelt, ez a körülmény bizonyos esetekben teljesen a valóságtól eltérő, félrevezető eredményhez vezethet. Ezzel szemben a (36) kifejezés értéke csak elhanyagolható mértékben változik nagyon nagy  $X_i$  különbség előfordulásakor. Ezt a tulajdonságot rezisztenciának nevezzük. Tehát a legkisebb négyzetek elve nem tekinthető rezisztensnek, míg a (36) egyenlettel egy rezisztens statisztikai eljárást kapunk.

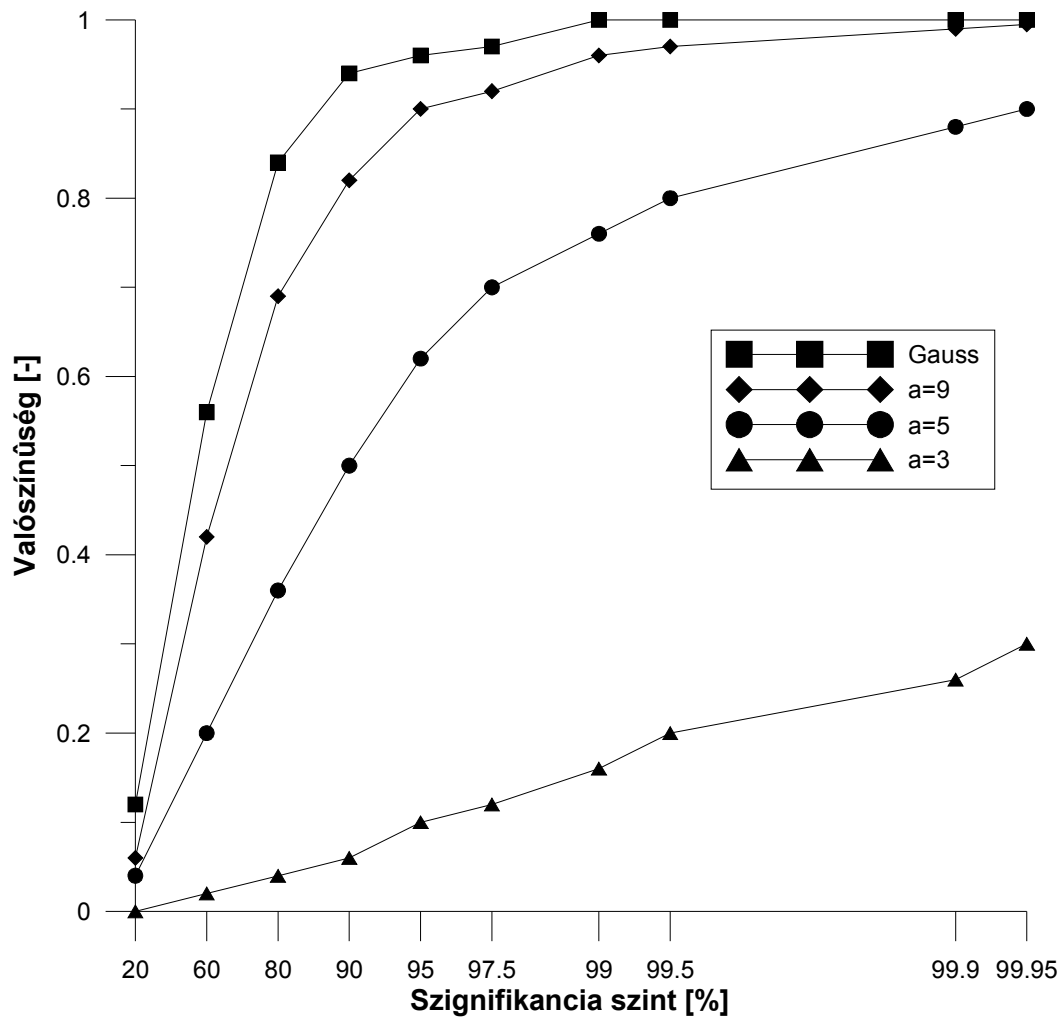
A maximális reciprok összeg módszerét alkalmazva a Steiner Ferenc által vezetett geostatisztikai kutatócsoport (amelyek magam is tagja lehettem mintegy 10 éven át) a Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén kifejlesztette a leggyakoribb érték (MFV) eljárást (Steiner 1988 és 1990, Hajagos és Steiner 1991, Steiner (ed) 1991 és 1997). Egy statisztikai módszert akkor nevezhetünk "MFV" eljárásnak, ha az  $X_i$  eltéréseknek leggyakrabban kicsi (vagy közel nulla) értékei vannak. A (36) egyenlet feltétele biztosítja, hogy az  $X_i$  különbségek döntő többsége a lehető legkisebb legyen (nem számít, hogy közben néhány  $X_i$  érték nagyon nagy). Következésképpen olyan statisztikai eljárások, amelyek a (36) egyenletből származnak, MFV módszernek nevezhetők. Bebizonyítható, hogy a következő feltétel eredménye szintén az MFV eljárásba sorolható:

$$\prod_{i=1}^{ND} (X_i^2 + S^2) = \text{minimum}. \quad (37)$$

Egy-dimenziós adatrendszer esetén, például ha a helyparamétert ( $T$ ) kívánjuk meghatározni, mind a (36), mind a (37) egyenlet valóban a "leggyakoribb értéket" adja olyan vonatkozásban, hogy a  $d_i^{\text{mért}}$  mért értékek a  $T$  környezetében fordulnak elő leggyakrabban. (Ebben az esetben  $X_i = d_i^{\text{mért}} - T$ ).

E témakörben megjelent legutóbbi könyv szerzői (Steiner (ed) 1997) az MFV eljárást “modern statisztikai módszereknek” hívják. Az biztos, hogy a “modern” jelző nem adja vissza hűen a közel négy évtized azon időtartamát, amelyen keresztül a kutatások és a módszer kifejlesztése folyt az MFV algoritmus megszületésétől kezdve (Steiner 1965). Sajnos csak kevés szakember tudja valójában mit jelent az MFV módszer. A klasszikus statisztika vezető szerepe még napjainkban is talán magyarázható annak a régi dogmának az elfogadásával, hogy “a hibák eloszlása mindig normális” (Steiner and Hajagos 1995). Szűcs (1997) bemutatta, hogy milyen félrevezető lehet a szakemberek részére, ha olyan statisztikai próbákat használnak, mint például a  $\chi^2$ -próba. A Monte Carlo szimulációk bebizonyították, hogy a  $\chi^2$ -teszt nem ajánlható a gyakorlatban előforduló földtudományi eloszlások normalitás vizsgálatára. Még ha a minták eléggé különböznek is a Gauss eloszlástól, a  $\chi^2$ -teszt elfogadja, mint normális eloszlásút a leggyakrabban alkalmazott magas szignifikancia szinteken (lásd 5. ábra). Ennek eredményként, amikor  $\chi^2$ -tesztet alkalmazunk, a Gauss anyaeloszlás látszólag domináns jelenléte hozzájárulhat a hagyományos (nem robusztus és rezisztens) statisztikai algoritmusok túléléséhez. Feltételezve a mérések normális eloszlását, a klasszikus becslések a „maximum likelihood” elvén alapulnak. Az MFV algoritmus egy teljesen más elvi megközelítést követ. Az MFV módszer az I-divergencia minimalizálásának elérésére törekszik (Steiner (ed) 1997). Az I-divergenciát relatív entrópiának vagy információvesztésnek is nevezhetjük (Tóth, Szűcs, Bódi and Civan 2003).

A NATO Tudomány a Békéért program keretében a Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai tanszék egy négy éves projekt keretében román és belga partnerekkel együtt elkészítette a Szamos, határral osztott alluviális összletének hidrodinamikai modelljét (Szűcs et al. 2004; Dassargues et al. 2004; Mincuna et al 2005; Szűcs, Lénárt, Tóth, Madarász, Faur és Virág 2005). A magyar fél részéről magam vezethettem a modellezési munkát, s a teljes adatbázis birtokában érdekes tudományos kiegészítő vizsgálatokat végezhettem. A regionális modell kalibrációjánál több mint 300 kút vízszint adatait használtuk fel. A kalibráció után elemzésre került az, hogy a mért és a számított vízszintek közötti különbségek a több mint 300 kút esetében vajon milyen eloszlást mutatnak. A 6. ábra ennek a típus-meghatározásnak az igen érdekes eredményét mutatja be. A vízszint különbségek közel Chauchy-eloszlást mutatnak, amely igen távol áll az ilyen esetekben feltételezett normál eloszlástól.

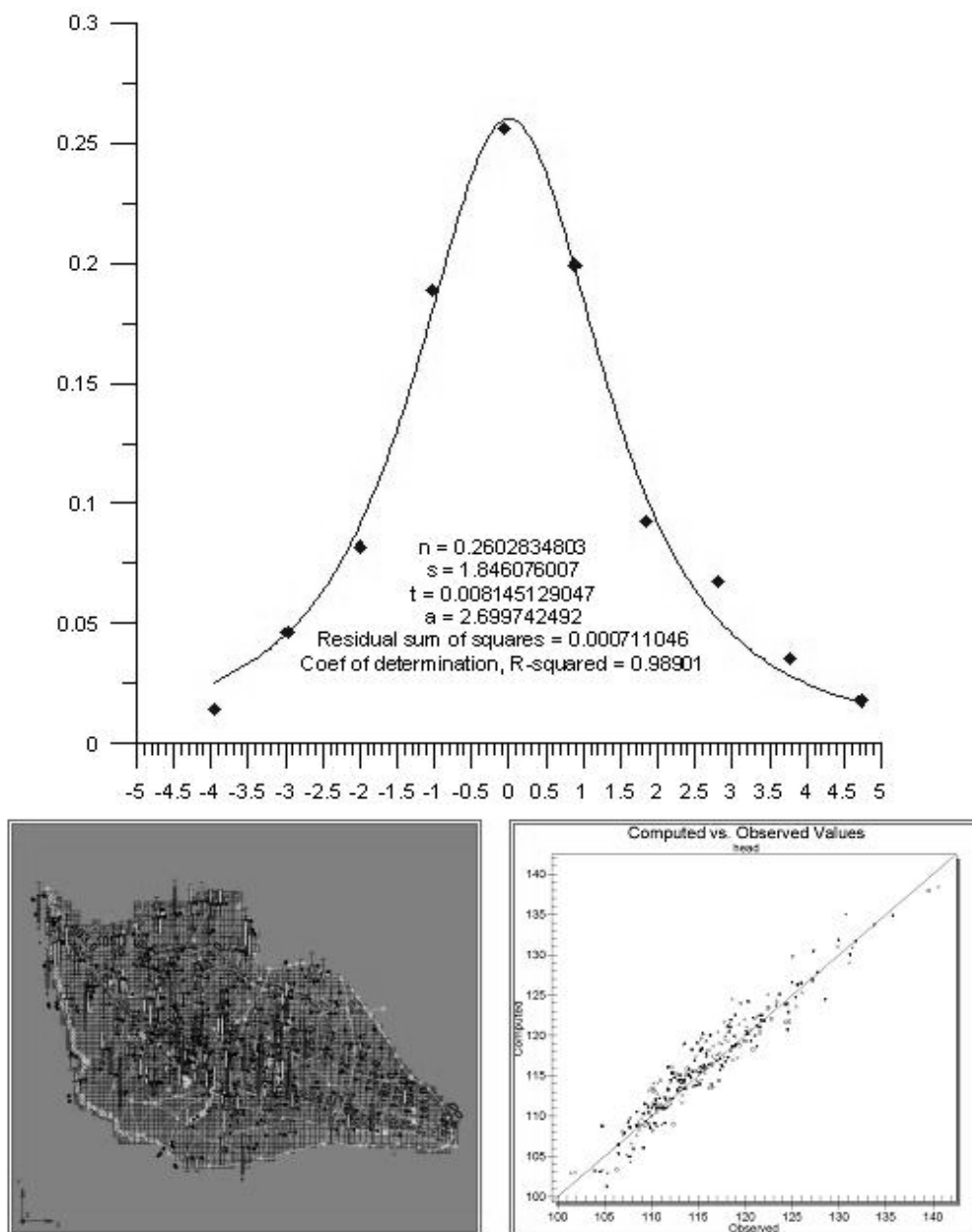


5. ábra

A  $\chi^2$ -teszt elfogadási valószínűségei különböző anyaeloszlásból származó minták esetében hagyományos normalitás vizsgálat alkalmazásakor (Szucs 1997).

Az MFV módszer esetében a bizonytalanság mérőszámaként is használható skála-paraméter (S) számítása a már fentebb említett I-divergencia, azaz információveszteség minimalizálásán alapul. Steiner (1991, 1997) bemutatta az információveszteség minimalizálásán keresztül azt, hogy a skálaparaméter számításának az algoritmusához milyen összefüggésre van szükségünk. A leggyakoribb érték módszer esetében a skála paramétert dihézióknak nevezzük, és a jelölése  $\varepsilon$ . Az  $X_i$  különbség értékek felhasználásával a dihézió számítása a következő módon adható meg:

$$\varepsilon^2 = \frac{3 \sum_{i=1}^{ND} \frac{X_i^2}{[X_i^2 + \varepsilon^2]^2}}{\sum_{i=1}^{ND} \frac{1}{[X_i^2 + \varepsilon^2]^2}} . \quad (38)$$



## 6. ábra

A kalibrált, határral osztott Szamos hidrodinamikai modell mért és számított vízszintjei eloszlásának elemzése több mint 300 mérési hely figyelembevételével (Szucs, Lenart and Toth 1997).

Mint látható, az  $\varepsilon$  értéke csak iterációs úton határozható meg. Nagyon fontos hangsúlyozni most is, hogy az  $\varepsilon$  skála paraméter nagyon rezisztens viselkedést mutat a kieső adatokkal szemben. A (36) és (37) egyenletekben az „S” skálaparaméterként célszerű a dihézió  $k$  szorosát szerepeltetni ( $S = k\varepsilon$ ). Az adott vizsgálat esetén a legjobb  $k$  (1, 2 vagy 3) értéke függ attól, hogy az  $X_i$  különbségek eloszlás típusa milyen jelleget mutat (Steiner 1990). A dihézió szerepe kulcsfontosságú az MFV módszer esetében.

Fontos tehát beszélnünk arról, hogy a modellezési hibák, amelyek a jelen esetünkben az  $X_i$  különbségek segítségével számszerűsíthetők, nagyon sokfajta eloszlást mutathatnak. A különbség értékek eloszlásainak vizsgálatakor az egyszerűség kedvéért beszéljünk standard sűrűségfüggvényekről, vagyis amikor a T helyparaméter zérus, illetve az S skálaparaméter értéke 1. A hagyományos statisztikai módszerek abból a feltételezésből indulnak ki, hogy a hibák normál vagy Gauss sűrűségfüggvénnyel közelíthetők. A Gauss sűrűségfüggvény standard alakja tetszőleges X érték esetében a következő:

$$f_G(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right). \quad (39)$$

A földtudományok területén azonban sohasem tudjuk előre, hogy a hibák eloszlása milyen lesz. Célszerű tehát definiálni egy olyan valószínűségi szuper-modellt, amely valamilyen paraméter változtatásával nagyon sokfajta sűrűségfüggvényt tud előállítani. Bár annak a valószínűsége igen kicsi, hogy a hibaeloszlásunk Gauss típusú lesz, általában szimmetrikus hibaeloszlásokat várunk a modellezési hibákra. Bizonyos esetekben persze lehetnek ferde eloszlásaink is. Ilyen esetekre Kitandis (1997) egy viszonylag egyszerű transzformációt javasol, amelynek eredményként szimmetrikus hibaeloszlás fog előállni. Steiner (1991, 1997) bebizonyította, hogy földtudományi hibaeloszlások modellezésére nagyon jól használható az  $f_a(X)$  sűrűség szupermodell család:

$$f_a(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{a}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{a-1}{2}\right)} \frac{1}{(1+X^2)^{a/2}}, \quad (40)$$



ahol az “ $a$ ” a szupermodell paramétere ( $a > 1$ ), míg  $\Gamma$  jelöli a jól ismert gamma függvényt, amelynek alakja:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad z > 0 \quad (41)$$

A sűrűségfüggvény szupermodell igen széles tartományt fog át. Például  $a=2$  esetén, az  $f_{a=2}(X)$  függvény a Cauchy sűrűségfüggvénynek felel meg:

$$f_{a=2}(X) = f_{Cauchy}(X) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + X^2}. \quad (42)$$

A széles szárnyú eloszlások mellett persze a klasszikus haranggörbe alakú normál eloszlást is tartalmazza a szupermodell. A Gauss sűrűségfüggvényt kapjuk, ha  $a \rightarrow \infty$ . Az ún. geostatisztikai sűrűségfüggvényt kapjuk  $a = 5$  esetén (Dutter 1987; Hajagos and Steiner 1995):

$$f_{a=5}(X) = \frac{3}{4} \frac{1}{(1 + X^2)^{5/2}}. \quad (43)$$

Dutter (1987) jelentős számú vizsgálat alapján mutatta be, hogy a földtudományok területén a geostatisztikai eloszlás tekinthető a legjellemzőbb eloszlás típusnak.

A klasszikus  $L_p$  normák helyett, az ún.  $P_k$  normákat definiálhatjuk a leggyakoribb érték módszerén alapulva (lásd (15) egyenlet). Jelen esetben az ún. normalizált  $P_k$  normát írjuk fel, amelyet célszerű akkor használni, ha különböző nagyságrendbe eső mérései adataink vannak.

$$P_k = \varepsilon \left[ \prod_{i=1}^{ND} \left( 1 + \frac{(d_i^{mért} - d_i^{cal})^2}{(k\varepsilon d_i^{mért})^2} \right) \right]^{\frac{1}{2ND}} \quad (44)$$

Ez a norma alak a (37) egyenlet minimalizálásán alapul. Nagy mérési adatrendszerek esetében a numerikus hibák csökkentése érdekében a hidrogeológiai, illetve fluidumbányászati modellezés során célszerűbb egy másik  $P_k$  norma alakot használni, amely a (36) egyenleten alapul:

$$P_k = 2\varepsilon(k^2 + 1) \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^{ND} \frac{X_i^2}{3(k\varepsilon)^2 + X_i^2}. \quad (45)$$

Az MFV módszer esetében könnyen megmutatható, hogy úgy működik, mint az iterációs úton újra súlyozott legkisebb négyzetes módszer. Bár az MFV módszer tehát technikailag így is definiálható, tudjuk, hogy a leggyakoribb érték teljesen más elméleti megalapozottsággal rendelkezik, mint a legkisebb négyzetes eljárások. Egyetlen ismeretlen esetén, azaz, ha a helyparamétert ( $T$ ) kell meghatározni, a következő dupla iterációs formula használható a  $T$  és az  $\varepsilon$  számítására:

$$T = \frac{\sum_{i=1}^{ND} X_i W_i(X_i)}{\sum_{i=1}^{ND} W_i(X_i)}, \quad (46)$$

ahol a súlyok  $W_i(X_i)$  és a dihézió a következőképpen számítható:

$$W_i(X_i) = \frac{(k\varepsilon)^2}{(k\varepsilon)^2 + (X_i - T)^2}, \quad (47)$$

$$\varepsilon^2 = \frac{3 \sum_{i=1}^{ND} (X_i - T)^2 (W_i(X_i))^2}{\sum_{i=1}^{ND} (W_i(X_i))^2}. \quad (48)$$

Emellett az is bizonyított, hogy az MFV eljárás nem csak rezisztens, hanem robusztus is. A robusztusságot általában kvalitatív értelemben használják: egy statisztikai eljárás hatékonysága nem túl érzékeny az eloszlástípus megváltozására. Az MFV módszer esetén a  $T$  helyparaméter becslésének véges aszimptotikus szórásnégyzete van, azaz a

nagy számok törvénye mindig teljesül a leggyakoribb érték számításaira. A legkisebb négyzetek módszere nem teljesíti ezt a törvényt, ha például a hiba eloszlása Cauchy típusú (Steiner (ed) 1991, 1997). Steiner (ed) (1991, 1997) bebizonyította, hogy a medián elvén alapuló  $L_1$ -módszer az összes lehetséges földtudományi hibaeloszlást figyelembe véve 50.1 % hatásfokú, ami sokkal jobb, mint a klasszikus statisztikai módszerek (az  $L_2$  normán alapuló) hatásfoka, amely nem több mint 7.8 %. Az MFV-módszerek statisztikai hatásfoka jelentősen nagyobb, mint az  $L_1$ - vagy  $L_2$ - eljárásoké. A  $P_k$  normák hatásfoka több mint 90 %.

Ezek után érdemes részletesebben beszélni az  $P_k$  normán alapuló MFV eljárás magas statisztikai hatásfokáról. Elméletileg egy statisztikai eljárás hatásfokának a legpontosabb definíciója a következőképpen adható meg (Dutter 1987):

$$\text{Statisztikai hatásfok} = 100 (\text{kinyert információ} / \text{összes információ}) \% \quad (49)$$

Az nem kérdéses, hogy ez a definíció adja vissza a valódi tartalmát a statisztikai hatásfoknak, de szükségünk van egy a gyakorlatban használható definícióra ennek a fontos mennyiségnek a numerikus számítására (Hajagos és Steiner 1995). A következő formula kielégíti ezt a kívánalmat:

$$e = 100 (\text{minimális aszimptotikus szórásnégyzet} / \text{aszimptotikus szórásnégyzet}) \% \quad (50)$$

A nevező számítható az aktuális alkalmazott statisztikai eljárásra. A számláló az ún. Cramer-Rao határ, amely szinte minden matematikai statisztikai kézikönyvben megtalálható. A Cramer- Rao határ ( $A_{\min}^2$ ) az  $f_a$  szupermodell adott „a” paraméterére a következő szerint számítható (Steiner (Ed) 1997):

$$A_{\min}^2 = \frac{a + 2}{a(a - 1)} \quad (51)$$

Steiner (Ed) (1997) szintén levezette az aszimptotikus szórásnégyzet értékét a legkisebb négyzetek és az MFV eljárásra, ha a vizsgált hibaeloszlás az  $f_a$  szupermodellből származik:

$$A_{L_2}^2 = \frac{1}{(a-3)}, \quad (52)$$

illetve

$$A_{MFV}^2 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{((k\varepsilon)^2 + x^2)^2} f_a(x) dx}{\left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(k\varepsilon)^2 - x^2}{((k\varepsilon)^2 - x^2)^2} f_a(x) dx \right]^2}. \quad (53)$$

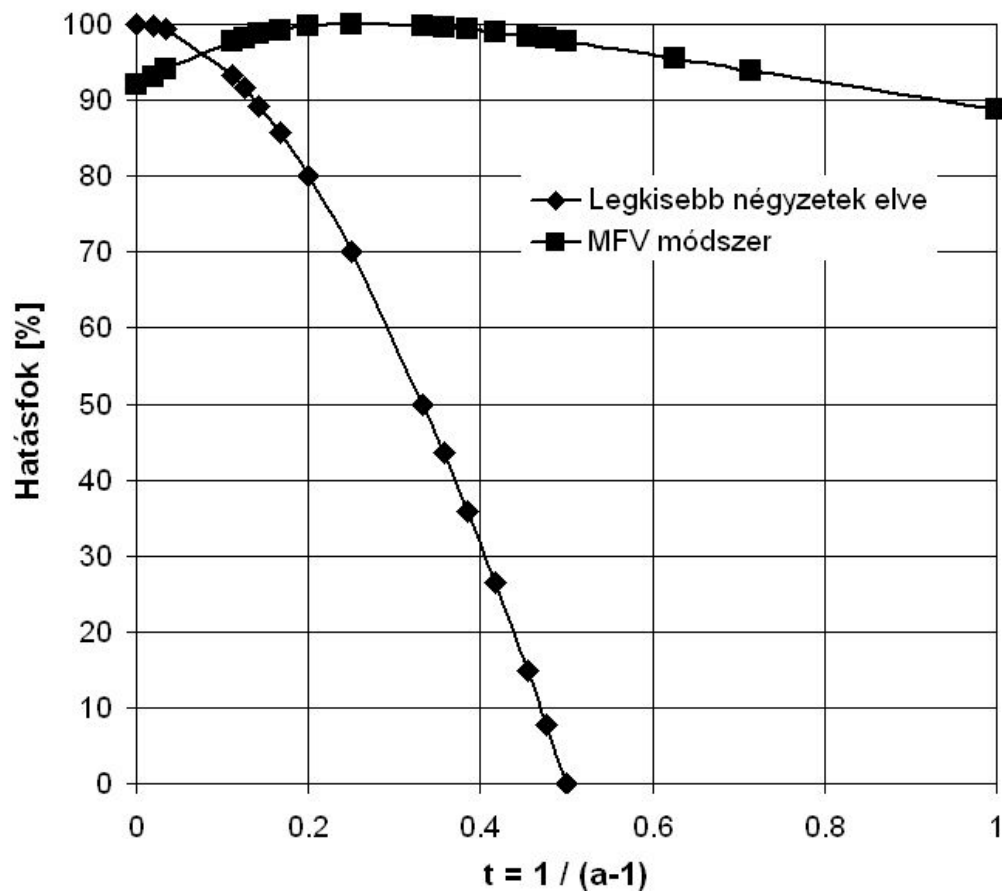
Ismerve ezeket az összefüggéseket, a hatásfok a legkisebb négyzetek és az MFV eljárásra szintén levezethető, ha az aktuális hibaeloszlás az  $f_a$  supermodell családból származik. Mint azt korábban említettük, az  $f_a$  supermodell a valós földtudományi adatok és hibaeloszlások igen széles tartományát képes reprezentálni az “a” supermodell paraméter változtatásával (Gausstól Cauchy típusig).

$$e(L_2) = \frac{(a+2)(a-3)}{a(a-1)} \quad (54)$$

$$e(MFV) = \frac{(a+2)}{a(a-1)A_{MFV}^2} \quad (55)$$

Az (54) és (55) egyenletek felhasználásával a 7. ábra ezeket a hatásfokokat mutatja a  $t = 1/(a-1)$  függvényében. Ez az egyszerű paraméter transzformáció előnyös, mert míg az “a” értéke 1-től  $\infty$ -ig változik, addig a “t” értéke 0 és 1 között marad. A transzformált t értéket felhordva az abszcisszára, a 7. ábra világosan megmutatja mit is jelent a robusztusság valójában. A legkisebb négyzetek módszere 100 %-os hatásfokkal működik Gauss hibaeloszlás esetén. Ez nem csoda, hiszen a legkisebb négyzetes becslés Gauss hibaeloszlás esetére lett kidolgozva. Ezt követően azonban a hatásfok élesen csökken nulláig, ha különböző súlyosabb szárnyakkal bíró eloszlásunk van. Ez az oka, amiért oly veszélyes a legkisebb négyzetek elvének alkalmazása bármely eloszlásra. Ezzel a viselkedéssel szemben, az MFV módszer igen nagy hatásfokot ( $> 90\%$ ) ad függetlenül az eloszlás típusától. Az MFV módszer a legjobb becslés a geostatistikai eloszlás ( $a = 5$ ) esetén, ahol a hatásfok értéke 100 %. A bemutatott hatásfok értékek

alapján az MFV módszer robusztus jellege és hidrogeológiai, illetve földtudományi alkalmazhatósága vitathatatlan.



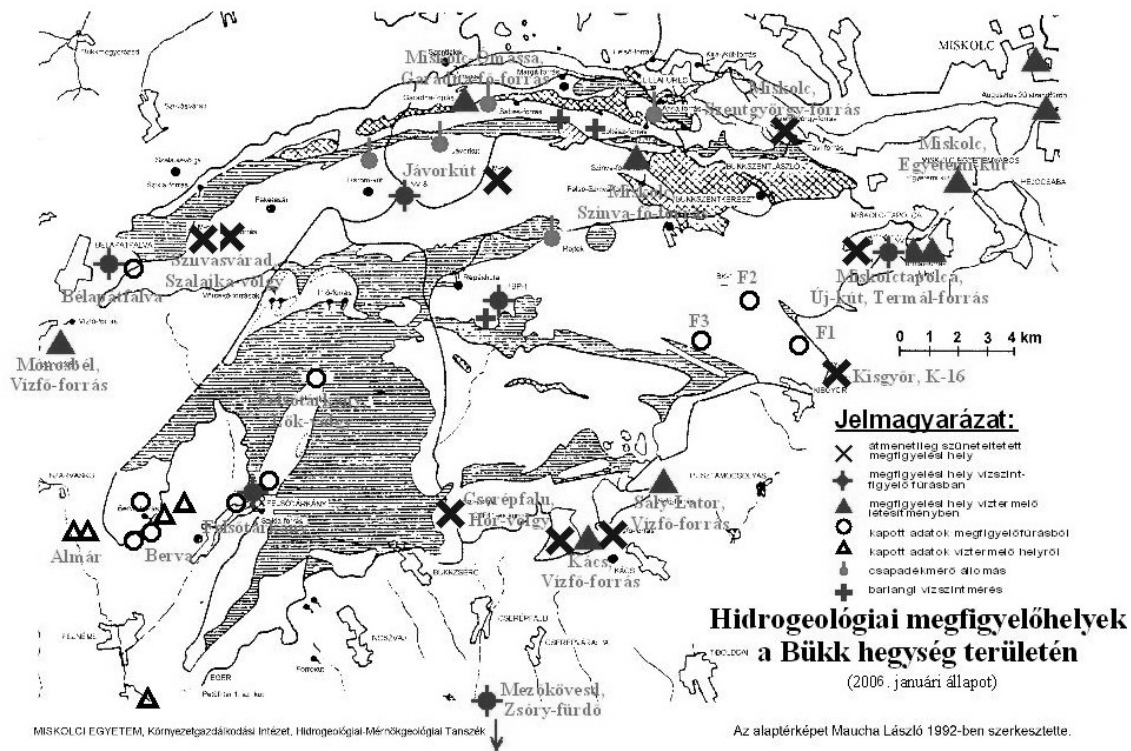
7. ábra

A hatásfok görbéje a legkisebb négyzetek és az MFV módszerre az  $f_a(X)$  szupermodell családból való hibaeloszlás esetén.

### 3.4. Az MFV módszer és a globális optimalizáció alkalmazása szintetikus és terepi modellezési problémákban

Az MFV módszer és a globális optimalizáció alkalmazása igen széleskörű lehet a vízbányászatban és a hidrogeológiában, illetve a hidrodinamikai és transzport modellezés területein (Tóth, Bódi and Szűcs 2000; Szűcs and Tóth 2002; Nyári, Szűcs and Tildy 2003). Különböző minimalizálandó kifejezések, célfüggvények, helyparaméterek és hibaparaméterek, sőt még regresszióanalízis is definiálható az MFV

módszer használatával a hidrogeológia és a földtudományok különböző problémáiban. A 8. ábra a Miskolci Egyetem Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszéke (Lénárt 2006) által üzemeltetett bükki monitoring rendszer főbb elemeit mutatja be.

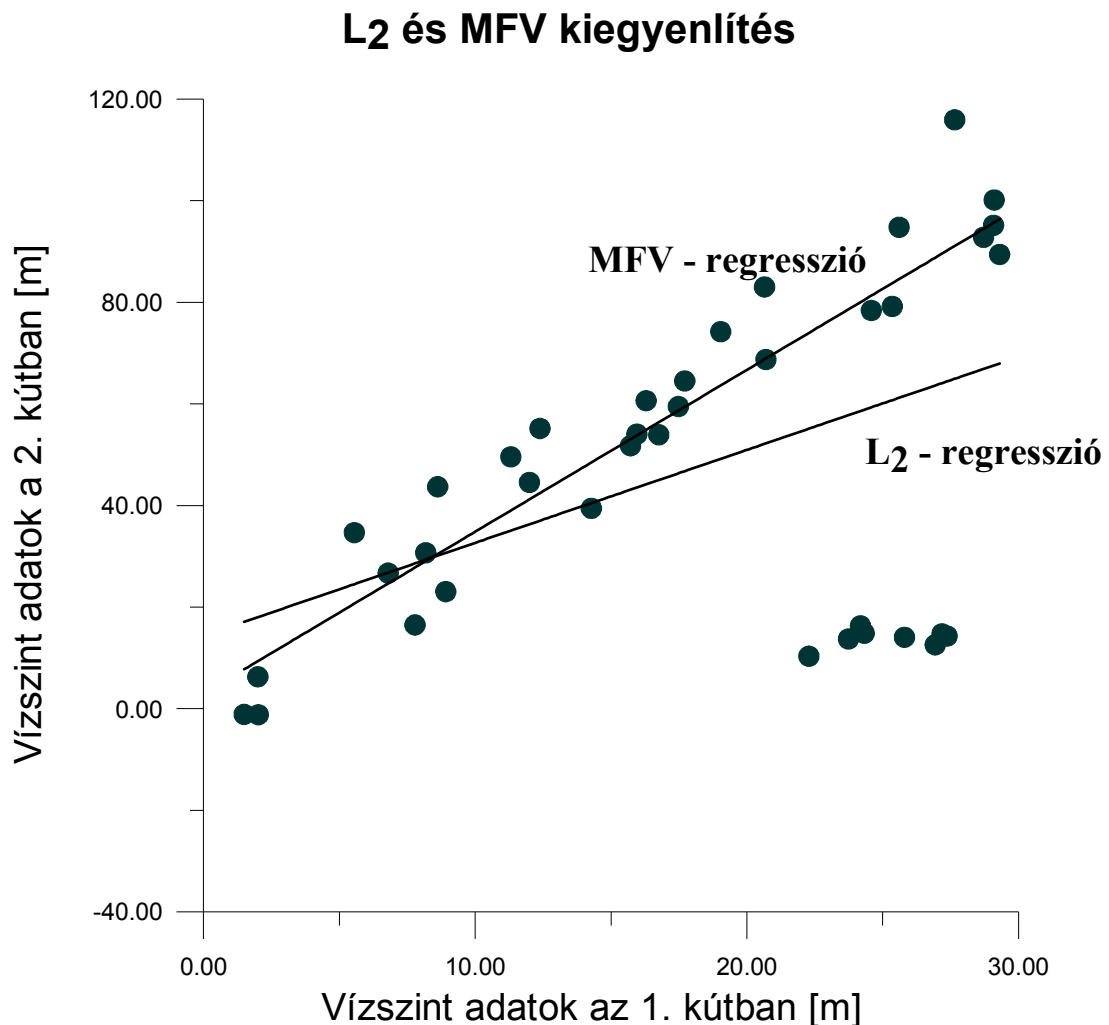


8. ábra

A Bükkben létrehozott komplex hidrogeológiai monitoring rendszer elemei. (Lénárt 2006).

A 9. ábra egy példát mutat be egyszerű lineáris illesztésre. Egy hidrogeológiai vizsgálat keretében a nevezett bükki monitoring rendszer két különböző kútjában történt vízszintmérés a már üledékes peremi területen, ahol erős korreláció van a vízszintek között a beszűrőzött rétegek közötti hidraulikus kapcsolat miatt. Ez a jelenség nagyon gyakran előfordul az üledékes rendszerek esetében, ahol az egyes vízáadó rétegek között átszivárgás lép fel. A vízszintek között fennálló erős kapcsolatot az általánosított és robusztifikált korrelációs tényező szintén megadta (Steiner (Ed) 1997). A hagyományos lineáris korrelációs tényező csak gyenge kapcsolatot mutatott a kieső adatok miatt. A 9. ábra jól szemlélteti, hogy milyen erősen befolyásolja néhány kieső adat (ami jelen esetben emberi tévedés eredménye volt) a legkisebb négyzetek elvén alapuló lineáris

kapcsolatot. Ezzel szemben az MFV módszer elhanyagolja a mérési hiba miatti kieső adatokat és a valós lineáris fizikai korrelációt szolgáltatja.



**9. ábra**

Lineáris regresszió vízszint adatokra a legkisebb négyzetek és az MFV elv használatával.

Szűcs (2002), és Szűcs és Ritter (2002) sikeresen alkalmazta az MFV módszert az Észak-Magyarországi Regionális Vízművek illetékességi területén különböző vízbázis-védelmi célú terepi próbaszivattyúzások kiértékelésében. Egy az MFV elvén alapuló geostatistikai módszert fejlesztettek ki a hidraulikus paraméterek meghatározására, és többlet információként sor került ezen paraméterek bizonytalanságának meghatározására is, amely szükséges a megbízható hidrodinamikai modellezéshez. A javasolt algoritmus jól helyt állt stabilitás, konvergencia és robusztusság szempontjából.

A javasolt új eljárás alkalmazhatósága bizonyítást és igen jó minősítést nyert a legkülönbözőbb próbaszivattyúzás kiértékelési módszerekre (Theis, Jacob, Hantush, Neuman, Witherspoon, stb.) is. A fő előnye a javasolt inverziós számításnak, hogy egyetlen mért terepi adathalmaz használatával a hidraulikus modellparaméterek bizonytalanságát vagy megbízhatóságát szintén meg lehet adni az MFV módszer és Monte Carlo szimuláció segítségével (10. ábra). A kidolgozott módszer alkalmazhatóságát és előnyeit számos északkelet-magyarországi régióból származó vízbázis-védelmi modell fejlesztését bemutató esettanulmányok példáján keresztül bizonyítottuk.

A kidolgozott minőségellenőrzött módszer lényegét a Theis kiértékelésen keresztül mutatjuk be, amikor is a próbaszivattyúzási adatok segítségével meghatározzuk a vizsgált vízadó transzmisszivitását (T) és tárolási tényezőjét (S) (Lee 1999). A javasolt módszer természetesen hasonlóan alkalmazható egyéb próbaszivattyúzási eljárásnál is. A Theis értékelés esetében néhány vízföldtani modell feltételezéssel is élünk, amelyek közül a következőket emeljük ki:

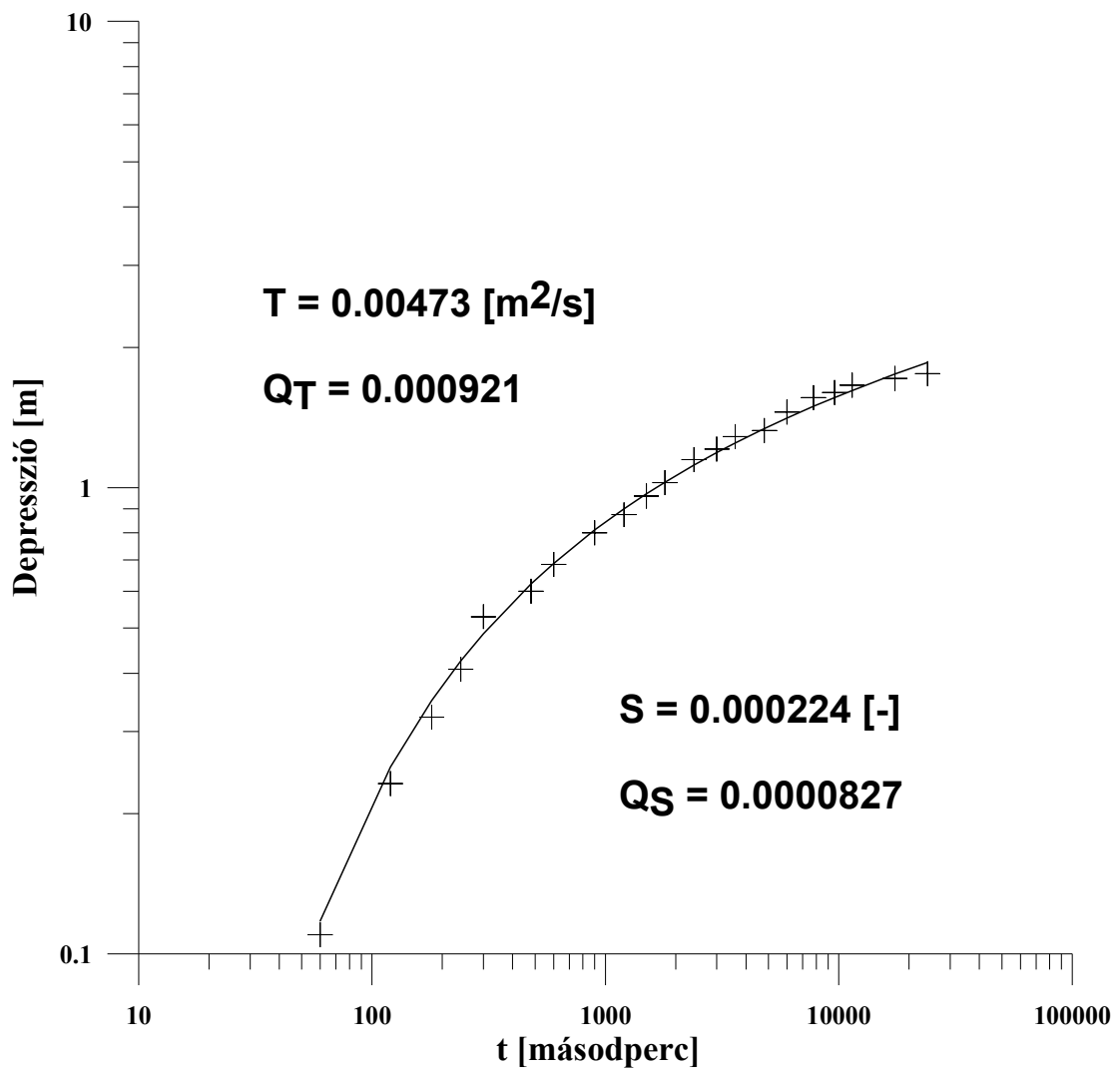
- a vizsgált vízadó nyomás alatti,
- a vízadó rétegvastagsága állandó, és a réteghatárok párhuzamosak,
- a vízadó laterális kiterjedése végtelennek tekinthető,
- a vizsgált felszín alatti közeg homogén és izotróp,
- a vizsgált rétegbe a fedőből és feküből nem történik átszivárgás,
- a vizsgált vízadó összenyomhatóság szempontjából rugalmas viselkedést mutat,
- a vízadó forrás mentes.

A termelő kút esetében függőleges teljes kútra gondolunk, ahol a kút sugara elhanyagolható a tápterület mellett, illetve a kút térfogata sem jelentős. E feltételezésekkel élve, a távolságtól ( $r$ ) és időtől ( $t$ ) függő depresszió  $\Delta h(r, t)$  egy nyomás alatti vízadó esetében a következőképpen írható fel:

$$\Delta h = \frac{Q}{4\pi T} W(u), \quad (56)$$

ahol a dimenzió nélküli Theis kút függvény az alábbi integrál kifejezéssel adható meg.





10. ábra

Próbaszivattyúzási adatok értékelésénél a vízföldtani paraméterek és azok bizonytalanságának meghatározása az MFV módszer és globális optimalizáció alkalmazásával.

$$W(u) = \int_u^\infty \frac{e^{-\xi}}{\xi} d\xi, \quad u = \frac{r^2 S}{4Tt}, \text{ ahol} \quad (57)$$

$Q$  – a szivattyúzott kút hozama [ $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ ],

$T$  – a transzmisszivitás [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ],  $S$  – a tárolási tényező [-],

$r$  – a szivattyúzott kúttól mért távolság [m], míg a  $t$  – az idő [s].

A direkt feladat megoldása során a  $W(u)$  függvény értékeinek számítására nagy pontosságú polinom összefüggést használhatunk (Abramowitz and Stegun 1964). Abban az esetben, ha  $0 < u \leq 1$ , akkor

$$W(u) = -\ln u + a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^4 + a_4 u^4 + a_5 u^5, \quad (58)$$

ahol a polinom konstansainak értékei:

$$\begin{aligned} a_0 &= -0.57721566 & a_1 &= 0.99999193 & a_2 &= -0.24991055 \\ a_3 &= 0.05519968 & a_4 &= -0.00976004 & a_5 &= 0.00107857, \end{aligned}$$

míg abban az esetben, ha  $1 < u < \infty$ , akkor

$$W(u) = \frac{[u^4 + a_1 u^3 + a_2 u^2 + a_3 u + a_4]}{[u^4 + b_1 u^3 + b_2 u^2 + b_3 u + b_4] u \exp(u)} \quad (59)$$

A konstansok értékei ekkor:

$$\begin{aligned} a_1 &= 8.5733287401 & a_2 &= 18.0590169730 & a_3 &= 8.6347608925 & a_4 &= 0.2677737343 \\ b_1 &= 9.5733223454 & b_2 &= 25.6329561486 & b_3 &= 21.0996530827 & b_4 &= 3.9584969228. \end{aligned}$$

Az (56) egyenlet által definiált direkt feladat nagy pontosságú megoldása után a leggyakoribb értékek elvén alapuló  $P_k$  eltérésnorma minimalizálását oldottuk meg globális optimalizáció (SA) alkalmazásával a próbaszivattyúzás adatok értékelése során. Így a fontos vízföldtani adatokat a korábban alkalmazott eljárásoknál nagyobb pontossággal sikerült meghatározni. A végeredményül adódó  $P_k$  norma értéke egyben a mérési adatrendszer megbízhatóságáról és az inverzió hibájáról is tájékoztatja a szakembert. Az újszerű minőségellenőrzött kiértékelés során további eredményként azt is megvalósítottuk egy viszonylag egyszerű Monte Carlo szimuláció segítségével, hogy az inverzióval nyert modellparaméterek hibáit is meghatározzuk. A földtudományok különböző területein végzett korábbi munkáink (Szucs 1997) és a Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén működő geostatistikai team eredményei (Steiner 1997) is bizonyították a következő feltevést. A földtudományok területén, így a

hidrogeológiában, illetve a fluidumbányászat területén előforduló hibaeloszlások közül is nagyon sok leírható az  $f_\alpha(x)$  szupermodell családdal. Ha egy stabil hibaeloszlás  $f_\alpha(x)$  valószínűségi sűrűségfüggvény szupermodell családból származik (egy adott  $\alpha$  - értékkel és  $S$  skálaparaméterrel), akkor, ha a természet adta hibákra ugyanolyan nagyságú véletlenszerű hibát szuperponálunk, akkor a kapott eredmények eloszlásában az  $S$  skálaparaméter értéke  $2^{1/\alpha} S$ -re módosul. A hiba szuperpozíciót és az inverziós procedúrát többször megismételve elő tudjuk állítani egy adott  $p_j$  modellparaméter empirikus eloszlását. Ekkor meghatározhatjuk az empirikus eloszlás intersextilis féltérjedelmét ( $\overline{Q}$ ). Természetesen minket csak az eredeti hibához tartozó modellparaméter eloszlás interszextilis féltérjedelme ( $Q$ ) érdekelne. A legtöbb esetben élhetünk azzal a feltételezéssel, hogy az eredeti hiba eloszlásunk a földtudományok területén a legnagyobb valószínűséggel előforduló geostatisztikus eloszlás ( $f_a(x)$ ,  $a=5$ ). Azt is bizonyítottuk, hogy a geostatisztikus eloszláshoz legközelebb eső  $f_\alpha(x)$  esetében az  $\alpha$  értéke 1.677. Az eredeti adatrendszer inverziója során előállt reziduálok  $Q_{emp}$  értéke alapján becsülni lehet az eredeti hiba skálaparaméterét. Így ezután már szuperponálhatunk többlet geostatisztikus hibákat az eredeti mérési anyagunkra, abból a célból, hogy az inverziót többször elvégezve előállítsuk az adott modellparaméter empirikus eloszlását. Az így előálló eloszlás hibajellemzője  $2^{1/1.677}$ -vel lesz nagyobb, mint az eredeti mérési adatokhoz tartozó modellparaméter eloszlás hibajellemzője. Ennek a többlet faktornak az értéke körülbelül 1.5. Ez azt is jelenti, hogy az ismételt inverziók eredményeként előálló  $\overline{Q}_p$  értékeket  $2/3$  -dal megszorozva megkaphatjuk az eredeti mérési anyag inverziója során kapott  $p_j$  modellparaméterek  $Q_p$  hibáját. Így megvalósítható a próbaszivattyúzási adatok minőségellenőrzött kiértékelése. Az itt leírtak bizonyítására és a gyakorlati alkalmazhatóság bemutatására számtalan sikeres Monte Carlo szimulációs vizsgálatot végeztünk szintetikus és valós terepi próbaszivattyúzási adatokon.

A 10. ábrán látható próbaszivattyúzási adatsor minőségellenőrzött kiértékelése az alábbi módon történhet. Az Észak-magyarországi Regionális Vízművek egyik nyomás alatti rétegvizes kútjában nyolc óra hosszúságú mérést hajtottak végre a vízföldtani jellemzők meghatározása céljából. A szivattyúhozam ( $Q = 0.008 \text{ m}^3/\text{s}$ ) végig állandó volt a mérés

ideje alatt. A vízszintek időbeli változását, illetve a depressziókat egy megfigyelő kútban mérték. A távolság a termelő és a megfigyelő kút között 40.5 m volt.

Az SA optimalizáción alapuló inverzió alkalmazásával végrehajtott Theis módszer segítségével elvégeztük a kiértékelést a transzmisszibilitási tényező (T) és a tárolási tényező (S) meghatározására. A P normára épülő hibafüggvény minimalizálása után az alábbi hidraulikai eredményeket kaptuk:

$$T = 4.73 \cdot 10^{-3} \text{ [m}^2\text{s}^{-1}\text{]}, S = 2.24 \cdot 10^{-4} \text{ [-]}, E = 0.03959.$$

A minőségellenőrzött kiértékelés eredményét láthatjuk a *10. ábrán*. A kapott hidraulikai modellparaméterek hibáinak a meghatározására a fentebb említett procedúrát alkalmaztuk. A kapott eltérésnorma alapján (E) megállapíthatjuk, hogy a számított és mért vízszintek közötti különbség kb. 4 cm. Az első inverzió után előálló reziduálok értéke alapján szuperponáltuk a mért adatokra a többlet hibát. Az előálló új adatrendszeren is elvégeztük az SA inverziós kiértékelést. Ezt összesen 27 alkalommal ismételtük meg. Így az eredményül kapott modellparamétereknek előállítottuk az empirikus sűrűségfüggvényét. Ebből az empirikus eloszlásból meghatároztuk a  $\overline{Q_T}$  és a  $\overline{Q_S}$  értékeket. A korábban leírt megfontolásokat figyelembe véve a kapott értékeket  $2/3$ -dal szorozva kapjuk az eredeti mérési anyag inverziója során előállt vízföldtani modellparaméterek hibáját:

$$Q_T = 0.000921, \quad Q_S = 0.0000827.$$

A javasolt új eljárás gyakorlati alkalmazhatóságát és megbízható, hatékony működését számtalan hazai és külföldi példán keresztül bizonyítottuk. A kapott minőségellenőrzött és megbízhatóbb eredmények hatékonyan tudták növelni egy adott régióban készült vízbázisvédelmi hidrodinamikai és egyéb célú modellek megbízhatóságát.

Marsily és társai (2000), valamint Carrera et al. (2005) kiváló áttekintő cikkeket írtak a hidrogeológiában előforduló modellezési és inverz problémákról. A cikkek bemutatták, hogy mennyire sokrétű és kihívásokkal teli ez a kutatási terület a vízbányászat, illetve a fluidumbányászat területén is. Habár Carrera és Neuman (1986a, b, c) egy nagyon jó

összefoglalást adtak a hidrogeológiai modellezésben használt standard inverz technikákról, még mindig sok tudományos tennivaló akad, hogy a gyakorlati szakemberek számára is napi rutin feladattá tegyük az inverziós algoritmusokat. A következő esettanulmányok az MFV módszer inverziós alkalmazására mutatnak be néhány egyszerű példát a hidrodinamikai modellezés kalibrációs eredményeinek meghatározásához és javításához. A nyugalmi vízszint eloszlás becslése, amelyet az áramlási modellből számíthatunk, szolgál az alkalmazott modell kalibrációjának alapjaként. A kalibráció azon modellparaméterek kiválasztásának a folyamata, amelyekkel jó illeszkedést érünk el a becsült (vagy számított) és a mért vízszintek között (Hill 1998). Bizonyos esetekben az áramlási modell kalibrációjában nem csak a vízszintek, hanem a vízhozamok is szerepet játszanak. Gyakorlatilag a kalibráció egy inverz eljárásnak tekinthető. Leggyakrabban a kalibrációt a szakember gyakorlati tapasztalatán alapuló ún. trial-and-error módszerrel hajtják végre. A fentebb leírt matematikai megközelítésen alapuló inverziós kalibrációs módot automatikus kalibrációnak nevezik a hidrodinamikai modellezésben (Hill 1992). A célfüggvény, mint kalibrációs kritérium (Anderson and Woessner 1992) leggyakrabban az átlagos hiba (ME), az abszolút hiba ( $L_1$  norma, MAE) és a négyzetes hiba (RMSE error,  $L_2$  norm) a kereskedelmi forgalomban kapható és a gyakorlatban használt kereskedelmi programcsomagoknál (pl. a Visual Modflow, Processing Modflow vagy GMS). Például a modellekben szereplő vízszinteket tekintve az átlagos hiba (ME), az abszolút hiba (MAE) és az RMSE hiba a következőképpen definiálható:

$$ME = \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^{ND} (h_i^{mért} - h_i^{cal}), \quad (60)$$

$$MAE = \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^{ND} |h_i^{mért} - h_i^{cal}|, \quad (61)$$

$$RMSE = \left[ \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^{ND} (h_i^{mért} - h_i^{cal})^2 \right]^{0.5}. \quad (62)$$

Ezek mellett a jól ismert modellhiba kifejezések mellett kutatásainkban a fentebb említett  $P_k$  normát alkalmaztuk modell kalibrációs célokra. Mivel sosem tudjuk a valós

adatok és a modellezési hiba vagy eltérés eloszlását előre, a  $P_{k=2}$  norma a leginkább javasolható modellezési célokra. Ennek a definíciója a következő:

$$P_{k=2} = \varepsilon \left[ \prod_{i=1}^{ND} \left( 1 + \frac{(h_i^{mért} - h_i^{cal})^2}{(2\varepsilon)^2} \right) \right]^{\frac{1}{2ND}} \quad (63)$$

Az MFV módszer és a globális optimalizáción alapuló inverz kalibráció előnyeinek demonstrálására a következő két modellezési esettanulmány kerül bemutatásra. Először a fentebb leírt módszereket szintetikus adatokon próbáltuk ki és teszteltük. Majd egy tényleges hazai vízbázis védőterületének lehatárolása példáján keresztül mutatható be és illusztrálható a javasolt módszerek további elméleti és gyakorlati előnyei.

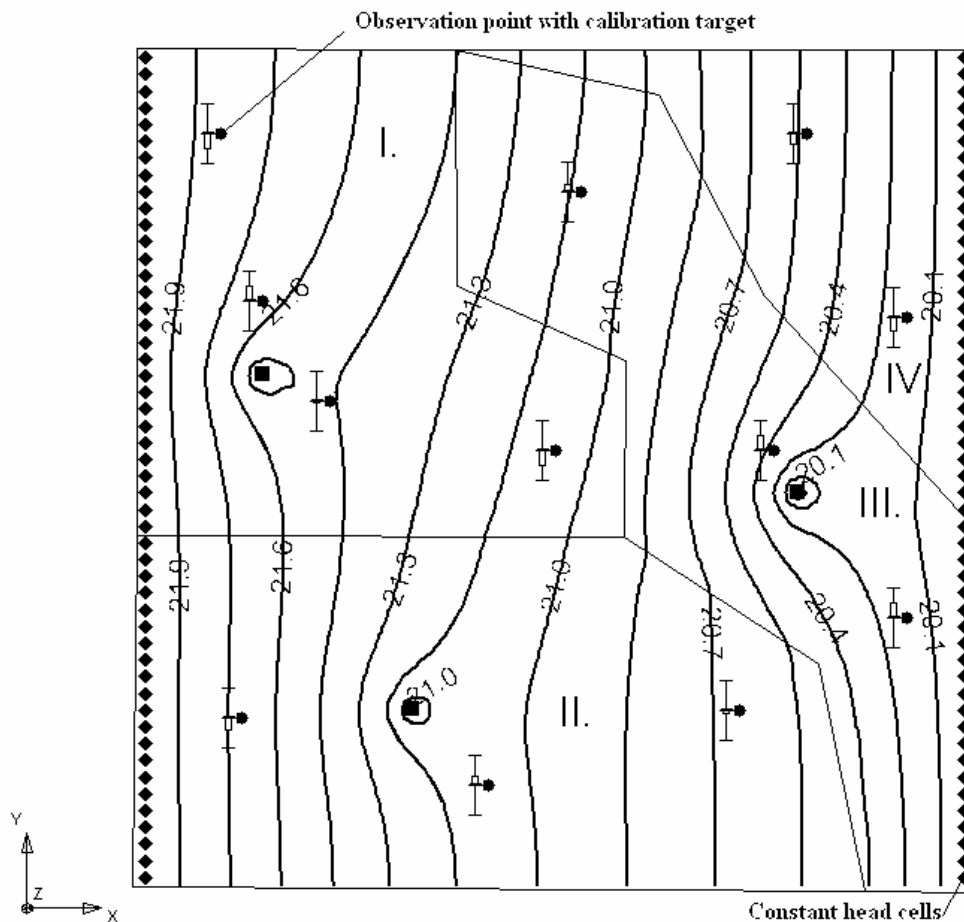
### ***Modellezési teszt probléma***

Egy egyszerű, nyílttükrű egyréteges, steady-state hidrodinamikai modellt készítettünk a javasolt globális optimalizáció (SA) és az MFV módszer viselkedésének leírására és szemléltetésére automatikus inverz kalibráció során. A modell horizontális x-y irányú kiterjedése 1 km \* 1 km. A modell réteg teteje 25 m-en van, az alja 0 m-en. Az alkalmazott cellaméret 20 m. Konstans 0.0003 m/nap beszivárgás értéket alkalmaztunk a grid háló tetejére. Négy poligont különítettünk el a vízádóban bekövetkező geológiai változékonyság reprezentálására. A horizontális szivárgási tényezőt minden egyes poligonra állandónak tételeztük fel. Állandó nyomásszintű határfeltétel alkalmaztunk a nyugati és keleti határokon a természetes nyugatról keletre történő talajvízáramlás modellezésére. Egy-egy termelőkút lett elhelyezve az I. (- 400 m<sup>3</sup>/s), II (- 500 m<sup>3</sup>/s) és III (- 300 m<sup>3</sup>/s) poligonokban. A IV. poligonban nem található kút. Mivel túlhatározott rendszereket részesítünk előnyben bármely statisztikai interpretációnál, 12 figyelőpontot helyeztünk el a hidrodinamikai modellben az automatikus kalibrációhoz. Munkánk és a szimuláció során modellezési környezetként a Groundwater Modeling System 4.0 (Environmental Modeling Research Laboratory (EMRL) of Brigham Young University 2002) programcsomagot alkalmaztuk a tesztfeladat megoldása során. Az adott modellparamétereken alapulva képesek voltunk felépíteni az áramlási modellt a MODFLOW- 2000 csomag (Harbough et al. 2000) segítségével. A MODFLOW modulon alapuló áramlási modell az aktuális modellparaméterekkel szolgáltatja az ún.

direkt feladat megoldást. A teljes modellrácsra a MODFLOW segítségével számított vízszintek a 12 kijelölt megfigyelőpontban pontosan meghatározhatóak. Valós, mért vízszintadatok szimulálására a megfigyelőpontokban 2 % véletlen jellegű geostatisztikai hibát ültettünk rá a pontos, számított vízszintekre. Mivel megvolt a hidrogeológiai modellünk és a “mért adatok”, az összehasonlító inverz számítások elkezdődhettek. A GMS 4.0 program háromféle beépített lehetőséget biztosít automatikus inverz paraméterbecslésekre. Ezek a PEST (Watermark Numerical Computing, Doherty 2000), a UCODE (Poeter and Hill 1998), és a MODFLOW- 2000 PES (Hill et al. 2000) eljárások. Ezek hasonlóak hatékonyságban és mindegyik a fentebb leírt klasszikus statisztikai megközelítésen és lokális minimumhely keresésen alapul (Filep et al. 2002). A MODFLOW-2000 PES (Harbaugh et al. 2000) módszert választottuk ki az általunk kifejlesztett, MFV eljárásán alapuló globális optimalizációs (Metropolis Simulated Annealing) inverziós módszerrel (jelöljük MFV– SA) való részletes összehasonlító vizsgálathoz. A GMS programcsomag biztosította fejlesztői környezet lehetővé tette, hogy az MFV– SA inverz módszert viszonylag egyszerűen hozzákapszóljuk a közismert MODFLOW- 2000 csomaghoz, amely a direkt feladat megoldását szolgáltatja. A jól ismert és most bevezetett hibafüggvények mellett (az RMSE és a P-norma), az (64) egyenletben megadott dimenzió nélküli relatív modell távolságot (RM) szintén alkalmaztuk az összehasonlított inverziós eljárások pontosságának jellemzésére (Dobróka et al. 1991).

$$RM = \left( \frac{1}{NM} \sum_{i=1}^{NM} \left( \frac{m_i^o - m_i}{m_i^o} \right)^2 \right)^{1/2}, \quad (64)$$

ahol NM a modell paraméterek száma (NM= 4 a jelen esetünkben),  $m_i^o$  az i-edik valódi modellparaméter értéke (jelen példa esetén a szivárgási tényező, illetve az áteresztőképesség),  $m_i$  az aktuális inverziós eljárással becsült i-edik modellparaméter. A szintetikus adatok felhasználása esetén a relatív modell távolság szintén jól használható jellemző, mivel az általunk előre felvett modell ismert, míg terepi probléma esetén ezt a paramétert nem tudjuk számítani, mivel a valós modellt sosem ismerjük pontosan (Szűcs, Madarász, Ilyés, Ulaga, Béres, Lossos 2006).



**11. ábra**

A leggyakoribb értékes inverziós (MFV-SA) eljárással kapott vízszintek az áramlási modellben.

A kidolgozott inverziós MFV módszer a klasszikus „Simulated Annealing” globális optimalizáció keresésen alapult, mivel jelen esetben csak négy modell paraméter szerepelt. Természetesen sokkal több modellparaméterrel rendelkező, nagyobb hidrodinamikai modellek esetében, a „Very Fast Simulated Annealing” optimalizációs eljárás jobban ajánlható a futási idő lecsökkentése érdekében. A Metropolis (SA) algoritmusban a következő paraméterek kerültek felhasználásra:

Kezdeti hőmérséklet:  $T_0 = 1.0$  ; Végso hőmérséklet:  $T_f = 0.0001$ .

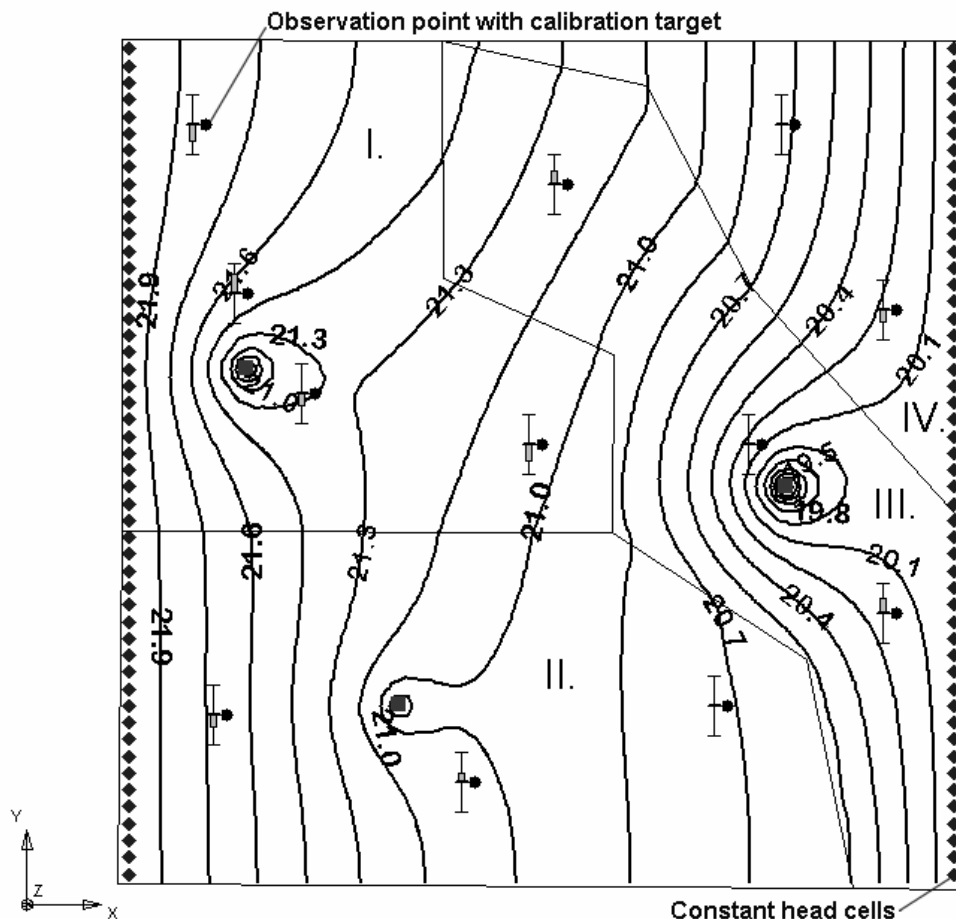
A hőmérséklet-csökkentési tényező:  $\alpha = 0.975$ ; az iterációk száma minden egyes hőmérsékleten:  $R(t) = 300$ .



Az 1. táblázat egy összefoglalót ad a MODFLOW-2000 PES és a MFV+SA inverziós algoritmussal elért legfontosabb eredményekről. Az eredmények világosan mutatják, hogy bár a célfüggvény értékei (RMSE és P norma) nincsenek messze egymástól, nagy különbség van a relatív modell-távolság (RM) értékeiben. A relatív modell-távolság fele akkora az MFV módszeren alapuló inverziós eljárás alkalmazása esetén. A 11. ábra közel ugyanazt az áramlási képet mutatja, mint az eredeti felvett kiindulási modell. A négy poligon, ahol az áteresztőképesség, illetve a szivárgási tényező értékei különböznek, szintén látszódnak mindkét ábrán (11. és 12. ábrák). Természetesen még az MFV-SA módszer sem képes visszaadni tökéletesen az eredeti modell paramétereit, de ez megérthető, hiszen mérési hibákat szuperponáltuk a mérési pontokon a vízszintekhez. A hidrogeológiai problémákban az jelent nehézséget, hogy a tényleges térbeli vízszinteloszlást sosem ismerjük tökéletesen (Anderson és Woessner 1992). Ebben a modellezési példában is csak 12 “mért adat” áll rendelkezésre. Ezért olyan fontos minden, a nyomásszintekhez, illetve vízszintekhez kötődő információ becslése. Ezért mondhatjuk, hogy a magas hatásfokú statisztikai módszereknek igen jelentős szerepe van a kiértékelés alatt. A 12. ábrán látható a másik szimulált áramlási kép, amelyet a MODFLOW-2000 PES paraméterbecslő eljárással számoltunk. Itt meg kell állapítani, hogy a szimulált vízszint eloszlás jelentős különbséget mutat a feltételezett kiindulási modellhez képest.

Modell terület	Eredeti paraméter	A kalibráció eredménye	
		MODFLOW-2000 PES	MFV – SA
I.	25 [m/day]	11.52 [m/day]	18.72 [m/day]
II.	35 [m/day]	27.65 [m/day]	32.14 [m/day]
III.	15 [m/day]	6.46 [m/day]	10.92 [m/day]
IV.	10 [m/day]	1.90 [m/day]	7.38 [m/day]
Hiba függvény		RMSE = 0.203 m	P norm = 0.172 m
Relatív modell távolság		RM = 0.58	RM = 0.27

**1.táblázat:** A MODFLOW-2000 PES és az MFV-SA módszerekkel kapott főbb eredmények 2 % geostatisztikai eloszlású hiba a megfigyelőpontokban mért vízszintekhez való hozzáadásával.



**12. ábra**

A MODFLOW-2000 PES inverziós eljárással kapott vízszintek az áramlási modellben.

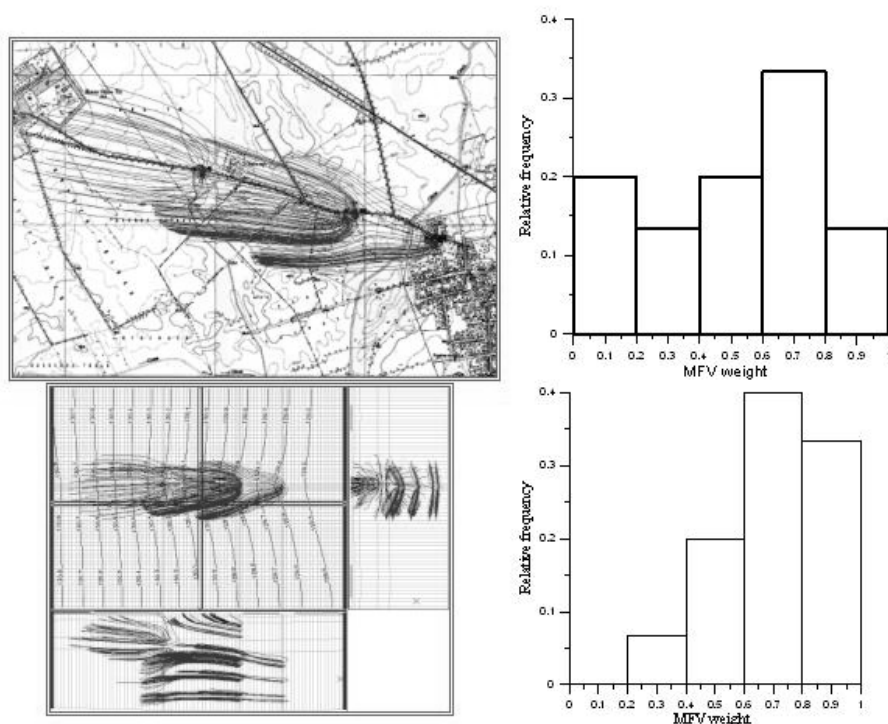
### ***Terepi modellezési probléma***

Az MFV módszeren alapuló kalibrációs modellezés előnyei számos terepi példán is bemutatathatók (Szűcs, Lénárt, Török, Horányiné Csiszár 2005; Szucs, Lenart, Somody and Toth 2006). Ugyanakkor az is köztudott, hogy egy automatikusan inverz modellező programot előállítani nem könnyű feladat (Galántai 2007). A saját szubrutin hozzácsatolása a standard modellező csomagokhoz szintén bonyolult programozói feladatot jelent. Éppen ezért a legtöbb gyakorlati szakember a hozzáférhető modellező

csomagokat használja a különböző típusú hidrogeológiai értékelésekhez. Ez az oka, amiért itt bemutatjuk, hogy az MFV eljárás milyen könnyen és előnyösen alkalmazható a hidrogeológiai értékelés javítására, még ha a felszín alatti vizekkel foglalkozó szakemberek a széles körben alkalmazott, professzionális modellező csomagokat alkalmazzák előszeretettel, mint a Groundwater Modeling System (GMS) vagy a Processing Modflow (Chiang and Kinzelbach 2001), illetve a Visual Modflow (Kovács 2004). Habár az említett programokban az automatikus kalibrációs modulok is be vannak építve, mint PEST, UCODE vagy MODFLOW- 2000 PES, az ún. „trial-and-error” kalibráció még mindig inkább gyakrabban alkalmazott eljárás a szakemberek körében (Kovács 2004). A következő vízbázisvédelmi modellezési példa azt demonstrálja, hogyan alkalmazható egyszerűen az MFV eljárás a hidrodinamikai modell kalibrációs eredményeinek javítására a hagyományos „trial- and- error” eljárás esetén is.

A sérülékeny üzemelő és távlati vízbázisok védőterületeinek kijelölésénél döntően a hidrodinamikai modellezés eredményére építünk. Hazánkban hasonlóan, mint más országokban ezek a védőövezetek, amelyekben belül a megengedhető emberi tevékenységeket szabályozzák, időbeli védelmet nyújtanak (Liebe 2007). Például 20 napos, 180 napos, 5 vagy 50 éves elérési időkhöz kötött védőövezetokről beszélhetünk. A 13. ábra az MFV súlyok használatával végzett „trial-and-error” kalibráció végső eredményét mutatja egy hazai vízbázisvédelmi projektnél (Celldömölk) az 50 éves elérési időre. Ebben az esetben a Processing Modflow Pro 7.0 csomag volt a hidrogeológiai modellező környezet. Mivel nincs elsődleges elképzelésünk a mért és a számított vízszintek közötti eltérések eloszlásának típusára vonatkozóan, a  $k=2$  érték használatát részesíthetjük előnyben. A „trial-and-error” kalibráció minden egyes lépésében, az MFV súlyok nagyon látványos és hasznos információt nyújtanak minden megfigyelőpontra az aktuális áramlási modell állapotáról az illeszkedés jóságának vonatkozásában. Minél közelebb van az MFV súly az 1- hez, annál jobb az illeszkedés a mért és számított adatok között az aktuális megfigyelési pontban. A modellezés eredményeként előálló súlyok egyenkénti értékelése mellett, az MFV súlyok hisztogramja szintén hasznos információt ad a kalibráció állapotáról. A 13. ábra bemutatja, hogy a hisztogramot nagy relatív gyakoriság értékek jellemzik a kis MFV súlyoknál a kalibráció folyamatának az elején. Az alsó hisztogramot, ami jelentősen eltér a felsőtől, a „trial-and-error” kalibráció végén kaptuk. Ha a kalibrációt jól végeztük el és a mért kiindulási adatok megbízhatóak, a hisztogramnak nagy relatív gyakoriságot

kell mutatnia az MFV súlyok nagyobb értékű intervallumában. Ily módon, az eltérésekből származtatott MFV súlyok könnyen gyorsíthatják a „trial-and-error” kalibráció folyamatát és minősítését a gyakorlati szakemberek számára.



**13. ábra**

Kalibrált áramlási modell az 50 éves elérési időhöz tartozó védőövezet lehatárolásához a celldömölki vízmű esetében. Jobb oldalon az MFV súlyok két hisztogramja található a kalibrációs eljárás alatt. Fent a kalibráció egy korai, míg az alsó a kalibráció végén kapott hisztogramot mutat.

### **3.5. Nem-paraméteres többváltozós regresszió szerepe a hidrogeológiai és vízbányászati modellek vizsgálatában**

E fejezet keretében bemutatásra kerül a Breiman and Friedman (1985) által kidolgozott ACE („Alternating Conditional Expectation”) algoritmus adaptációja, módosítása és alkalmazása különböző típusú hidrogeológiai és vízbányászati többváltozós regressziós problémák megoldására. Ez a nagy hatékonyságú és magas hatásfokú nem-paraméteres

regressziós vagy kiegyenlítési eljárás könnyen alkalmazható a vizsgált változók elemzésére. Az ACE algoritmus a különböző hidrogeológiai és fluidumbányászati modellváltozók olyan optimális transzformációját hajtja végre, ahol maximális korrelációra számíthatunk a transzformált függő változó és a transzformált független változók összegeként előálló becslés között. A javasolt módszer előnye az, hogy nem szükséges semmilyen „a priori” függvénykapcsolat feltételezése a vizsgált változók között, illetve az ACE algoritmus által létrehozott optimális függvény transzformációk csak a mérései adatainktól függenek. Ez a tulajdonság nagyon kedvező, hiszen a földtudományok területén igen gyakran alkalmazott tradicionális regressziós vizsgálataink mindig valamilyen változók közötti függvénykapcsolat feltételezésével indul. A kidolgozott új eljárás előnyeit és egyszerű alkalmazhatóságát számos hidrogeológiai és fluidumbányászati probléma megoldásán keresztül tanulmányozhatjuk. Bizonyítást nyert, hogy az ACE algoritmus megfelelő adaptációja jelentős előnyökkel bír a tradicionális többváltozós kiegyenlítési eljárásokkal szemben a legkülönbözőbb típusú földtudományi alkalmazásokban. Az egyéb mérnöki területeken már bizonyított ACE algoritmust a hidrogeológiában, illetve a vízbányászati modellezésben és értelmezésben korábban nem adaptálták és alkalmazták.

A fluidumbányászati regressziós vizsgálatok során a modellezési szakemberek megpróbálják leírni egy vagy több ún. független modell változó függő változóra kifejtett hatását. A földtudományi adatok feldolgozása során gyakran próbáljuk meghatározni a különböző típusú adatok között fennálló lehetséges kapcsolatokat. A hidrogeológiában vagy egyéb földtudományi területeken a hagyományos többváltozós regressziós vizsgálatok (Mosteller and Tukey, 1977; Kitanidis, 1997; Lee, 1999) során azonban szükséges valamilyen meghatározott típusú függvénykapcsolatot feltételeznünk a vizsgált változók között. A vizsgált paraméterek között fennálló komplex, és sokszor jósolhatatlan jellegű kapcsolatok miatt sokszor igen nehéz a megfelelő típusú függvénykapcsolatot megadni a függő és független változók esetében. A hidrogeológiai paraméterek értéktartományának nagy változékonysága esetében például a rutinszerűen alkalmazott hagyományos többváltozós regressziós eljárások gyakran nem reális eredményeket produkálnak (Kovács, Szacsuri, Szűcs, Lénárt, Csiszár Horányiné 2006).

A megfelelő statisztikai és optimalizációs alapokon nyugvó nem-paraméteres regressziós eljárások (Hardle, 1990) nagyobb rugalmasságot és megbízhatóságot

biztosítanak az adatfeldolgozás során a vizsgált változók közötti kapcsolatok feltárása érdekében. Ebben a tudományos fejezetben egy igen hatékony és viszonylag könnyen programozható nem-paraméteres eljárásnak a hidrogeológiai és fluidumbányászati sikeres első adaptációját és alkalmazási lehetőségeit mutatom be. Az ACE („Alternating Conditional Expectation”) algoritmus (Breiman and Friedman, 1985) igen hatékonyan alkalmazható többváltozós hidrogeológiai és fluidumbányászati regressziós problémák megoldására. Az ACE algoritmus módszer előnye az, hogy az egyes változók automatikus transzformációjával a legjobb regressziós kapcsolatot kaphatjuk a változók közötti fennálló kapcsolatok előzetes sejtése nélkül. Korábban az ACE algoritmus sikeres alkalmazását mutatta be Xue et al. (1997) és Wang and Murhpy (2004) különböző típusú mérnöki és környezeti adatokon.

A következőkben először bemutatásra kerül a hagyományos többváltozós lineáris regressziós algoritmus a legkisebb négyzetes algoritmus és a leggyakoribb értékek elvének felhasználásával (Steiner, 1991, 1997). Ezután sor kerül az ACE nem-paraméteres regressziós eljárás elméleti hátterének a bemutatására. Végül szintetikus és terepi példákon keresztül látható a javasolt ACE algoritmus alkalmazásának az előnye a hidrogeológiai, illetve a fluidumbányászati vizsgálatokban és modellezésben.

### ***Többváltozós lineáris regressziós vizsgálatok***

Többváltozós lineáris regressziót igen gyakran alkalmazunk különböző típusú földtudományi és fluidumbányászati mérési adatok feldolgozása és értékelése során. A többváltozós lineáris regresszió esetében megpróbáljuk a vizsgált függő változó értékét kettő vagy több független változó lineáris kombinációjának segítségével közelíteni. A többváltozós lineáris kiegyenlítés általános alakja a következő lesz, ha  $p$  darab különböző típusú független változó ( $X_1, X_2, \dots, X_p$ ) segítségével közelítjük a függő változó ( $Y$ ) értékét:

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^p b_i X_i + \varepsilon, \quad (65)$$

ahol  $b_0, b_1, \dots, b_p$  az regressziós koefficiensek, míg  $\varepsilon$  jelen esetben a kiegyenlítési hibát jellemzi a (65) egyenletben. Az (65) egyenlet tehát azt mondja a felhasználó számára,

hogyan a vizsgált  $Y$  függő változó az  $X_1, X_2, \dots, X_p$  független változók és egy véletlen jellegű hiba komponens ( $\varepsilon$ ) lineáris kombinációjaként írható fel. Ez a feltételezett lineáris paraméter kapcsolat abban az esetben lehet sikeres, ha a feltételezett modell kapcsolat a valóságban is helyénvaló. A legkisebb négyzetes ( $L_2$  normára épülő) regressziós analízis esetében (Lee, 1999) az eltérések vagy „reziduálok” négyzetének összegét minimalizáljuk a  $b_0, b_1, \dots, b_p$  regressziós koefficiensek meghatározása, illetve kiszámítása során.

A lineáris regresszió vagy kiegyenlítés során a különbség vagy „reziduál” ( $Res$ ) értéke az alábbi kifejezés szerint definiálható:

$$Res = Y - (b_0 + \sum_{i=1}^p b_i X_i). \quad (66)$$

Természetesen mátrix formában is kifejezhetjük a lineáris többváltozós kiegyenlítés alapösszefüggéseit. Az egyes változók esetében a megfigyelések vagy mérések számát jelölje  $n$ . Lineáris modellkapcsolatot feltételezve a változók között a következő mátrix egyenlethez juthatunk (Doherty, 2000).

$$Xb = Y \quad (67)$$

A (67) egyenletben  $X$  egy  $n \times p$  méretű mátrix, vagyis a mátrixnak  $n$  sora és  $p$  oszlopa van. A  $b$  mátrix egy  $p$  sorból álló oszlop mátrix, ahol az egyes sorokban a  $b_0, b_1, \dots, b_p$  regressziós koefficiensek szerepelnek.  $Y$  mátrix pedig egy  $n$  sorból álló oszlop mátrix, ahol az egyes sorokban a függő változó mért adatai szerepelnek. A legkisebb négyzetes közelítés, vagy az  $L_2$ -norma alapján a fenti mátrix egyenlet megoldása a regressziós koefficienseket tartalmazó  $b$  mátrixra a következő lesz (Doherty, 2000):

$$b = (X^T X)^{-1} X^T Y. \quad (68)$$

A (68) egyenletben szereplő  $t$  felső index a mátrix transzponáltat, míg a  $-1$  felső index a mátrix inverzió műveletét jelenti. Abban az esetben, ha a mérések száma  $n$  meghaladja a paraméterek számát ( $p$ ), akkor a (68) egyenlet egyértelmű megoldást szolgáltat a

regressziós koefficiensekre. Mivel ezen kívül a  $(X'X)$  kifejezés is egyértelműen meghatározható, a (68) egyenlet megoldása viszonylag könnyen származtatható numerikus szempontból is. Ha ezen kívül még valamilyen többlet információval is rendelkezünk az egyes megfigyeléseket illetően, akkor ebben az esetben a mért adatainkat még súlyozhatjuk is egy diagonális  $W$  mátrix segítségével. Ebben az esetben a (68) egyenlet alakja a következő formát veheti fel:

$$b = (X'WX)^{-1} X'WY. \quad (69)$$

Szucs et al. (2006) bemutatta, hogy még abban az esetben is, ha a feltételezett lineáris függvénykapcsolat helyes, az alkalmazott norma jellege alapvetően meghatározza a regressziós vizsgálat hatékonyságát és pontosságát (Toth, Bodi, Szucs and Civan 2005). Mint ahogy korábban is említettük, a földtudományok területén a mért adatok eloszlása nagyon sokféle típusú lehet, és majdnem minden esetben kell kieső adatokra is számítanunk. Azaz, az  $L_2$ -norma alkalmazása hidrogeológiai és vízbányászati regressziós vizsgálatokban sok szempontból is hátrányos következményekkel járhat. Ezért a robusztusnak és rezisztensnek tekinthető  $L_1$ -norma használata bizonyos esetekben előnyösebb lehet (Huber, 1981). A már korábban részletesen ismertetett leggyakoribb értékek elvére épülő P-norma (Steiner, 1991, 1997) azonban még az  $L_1$ -normánál is robusztusabb és rezisztensebb. Így a P-norma alkalmazása hidrogeológiai és fluidumbányászati lineáris többváltozós regressziós vizsgálatokban több szempont alapján is javasolható. Számos korábbi alkalmazása a P-normára épülő paraméteres regressziós vizsgálatoknak (Ferenczy et al., 1990; Szucs and Civan, 1996; Szucs, 2002; Szucs and Ritter, 2002; Szucs et al., 2006) bizonyította az MFV módszer előnyeit a hagyományos, legkisebb négyzetes módszerre épülő eljárásokkal szemben.

Bizonyos esetekben a többváltozós lineáris regressziós vizsgálatok igen hatékonyak lehetnek. A Miskolci Egyetem Alkalmazott Kémiai Kutatóintézetének munkatársaival egy olyan széles körben alkalmazható eljárást dolgoztunk ki, amelynek segítségével relatív permeabilitás görbéket lehet meghatározni laboratóriumi kizorítási adatok segítségével (Tóth, Bódi, Szűcs, Civan 1998; Tóth, Bódi, Szűcs, Civan 2002; Tóth, Bódi, Szűcs, Civan 2003). A mért adatok felhasználásával a javasolt új eljárás alapösszefüggéseinek meghatározásánál igen széleskörű regressziós vizsgálatot



végeztem mind az  $L_2$ -norma, mind pedig a P-norma felhasználásával (Tóth, Bódi, Szűcs and Civan 2005 a,b; Bodi, Toth, Szucs and Civan 2005; Toth, Bodi, Szucs and Civan 2006; Tóth, Bódi, Szűcs and Civan 2006).

Természetesen az is tény, ha a vizsgált változók közötti kapcsolat jellege nem ismert, vagy nem írható le pontosan, akkor a lineáris, de egyéb bármilyen függvénykapcsolatot feltételező többváltozós regressziós vizsgálat igen félrevezető eredményre vezethet, még ha a robusztus és rezisztens leggyakoribb értéken alapuló eltérésrendszert minimalizáljuk. Ezért van szükség a hidrogeológiai és vízbányászati modell vizsgálatok során olyan ún. nem-paraméteres eljárások alkalmazására, mint az ACE algoritmus.

### ***Az ACE algoritmus alkalmazásának elméleti háttere***

A vizsgált változók nem-lineáris transzformációja bevett gyakorlatnak tekinthető a különböző típusú regressziós problémák megoldása során. Teszzük ezt elsősorban két fő ok miatt. Egyrészt célunk a hiba szórásának stabilizációja, másrészt a hibaeloszlás normalizációját lehet így elérni. Ezekből még egy átfogóbb cél érhető el az ACE algoritmus alkalmazásának segítségével. Az ACE algoritmus olyan transzformációt alkalmaz az egyes vizsgált változók tekintetében, hogy a lehető legjobb kiegyenlítést érjük el az analízisbe bevont változók között. Az ACE algoritmus matematikai alapjait Breiman and Friedman (1985) dolgozta ki a Stanford Egyetemen. Az eljárás elméleti háttere az alábbiakban megismerhető. További részletek az eljárással kapcsolatban megtalálhatók Breiman and Friedman (1985) eredeti munkájában.

Legyenek  $Y, X_1, X_2, \dots, X_p$  véletlen változók, ahol  $Y$  legyen az ún. válasz vagy függő változó, míg  $X_1, X_2, \dots, X_p$  pedig az ún. független vagy becselő változók. A nevezett változók tekintetében jelöljenek a  $\theta(Y), \phi_1(X_1), \phi_2(X_2), \dots, \phi_p(X_p)$  kifejezések tetszőleges zérus helyparaméterű függvény transzformációkat. Ezek után a regressziós analízis során a függő változó transzformáltját (azzal a feltétellel, hogy  $E[\theta^2(Y)] = 1$ ) a független változók transzformáltjainak összegével közelítjük. Ebben az esetben a regresszió hibája a következőképpen írható fel:

$$e^2(\theta, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_p) = E \left( \left[ \theta(Y) - \sum_{i=1}^p \phi_i(X_i) \right]^2 \right). \quad (70)$$

A  $\phi_i(X_i), \dots, \phi_p(X_p)$  és  $\theta(Y)$  transzformáltakra vonatkozó  $e^2$  hiba minimalizációt egy speciális, egy függvényre vonatkozó minimalizációs sorozaton keresztül érhetjük el az alábbi két egyenlet alkalmazásával.

$$\phi_i(X_i) = E \left[ \theta(Y) - \sum_{j \neq i}^p \phi_j(X_j) \middle| X_i \right] \quad (71)$$

$$\theta(Y) = E \left[ \sum_{i=1}^p \phi_i(X_i) \middle| Y \right] / \left\| E \left[ \sum_{i=1}^p \phi_i(X_i) \middle| Y \right] \right\| \quad (72)$$

A (71) és (72) egyenletekben ún. feltételes elvárásokat megvalósító matematikai operátorok is szerepelnek az iterációs minimalizálási procedúra során. Innen adódik az ACE eljárás neve, mivel az „**A**lternating **C**onditional **E**xpectations” kifejezés változó feltételes matematikai elvárást jelent. A minimalizációs iterációs eljárás végeredményeként kapott végső  $\phi_1(X_1), \phi_2(X_2), \dots, \phi_p(X_p)$  és  $\theta(Y)$  függvénytranszformáltak becslései az optimális, legjobb regressziót biztosító  $\phi_1^*(X_1), \phi_2^*(X_2), \dots, \phi_p^*(X_p)$  és  $\theta^*(Y)$  transzformáltaknak. Vagyis a transzformált paraméterek terében a függő és független változók közötti kapcsolat a következő egyszerű alakot veszi fel:

$$\theta^*(Y) = \sum_{i=1}^p \phi_i^*(X_i) + e^*, \quad (73)$$

ahol  $e^*$  az ACE regressziós közelítés (zérus helyparaméterű eloszlással jellemezhető) hibáját fejezi ki. Az ACE eljárással elérhető minimális regressziós hiba tehát  $e^*$ , míg a többváltozós korrelációs koefficiens  $\rho^*$ , és értéke a regresszió hibájával a következő kapcsolatban áll:  $e^{*2} = 1 - \rho^{*2}$ .

Az említett, egyes változókra vonatkozó ACE transzformációk pusztán az adatokban rejlő információkon alapulnak, s nem szükséges semmilyen „a priori” feltevés a vizsgált változók közötti kapcsolatokat illetően. Ez azt jelenti, hogy az ACE algoritmus egy igen hatékony eszközt jelenthet a legkülönbözőbb típusú földtudományi adatok feldolgozására és elemzésére. Az alábbi egyenlet segítségével állítható elő a függő változó számított, illetve az ACE algoritmus alapján becsült értéke  $p$  darab független változó segítségével.

$$Y^{pre} = \theta^{*-1} \left[ \sum_{i=1}^P \phi_i^*(X_i) \right]. \quad (74)$$

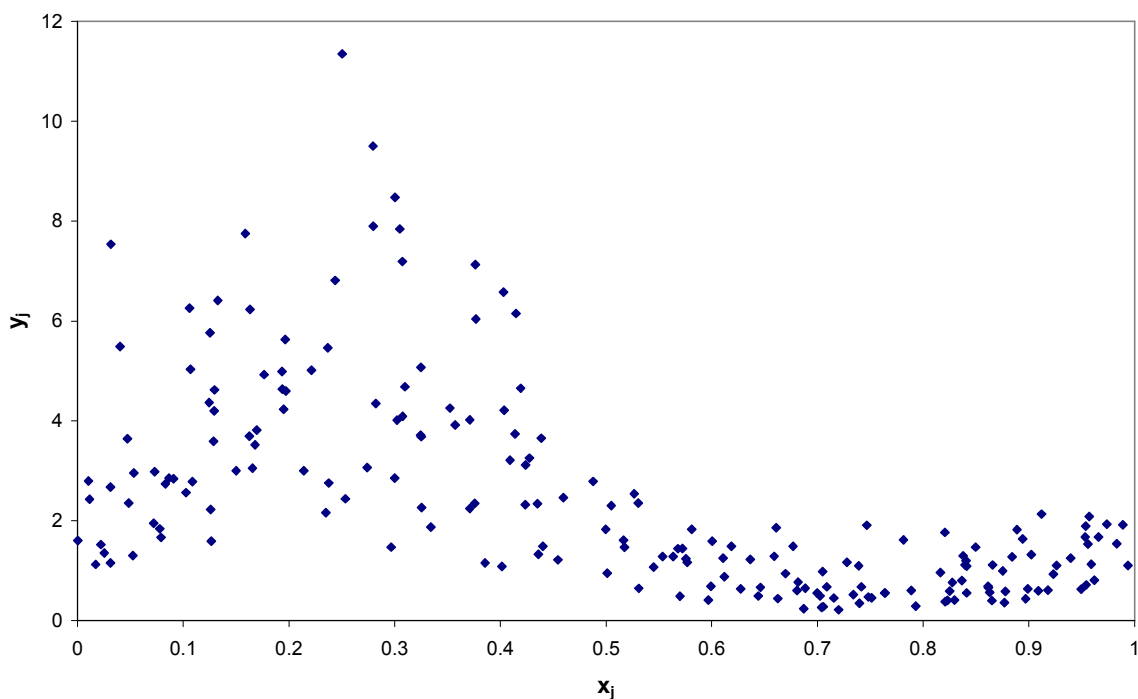
A gyakorlatban, amikor az ACE algoritmust egy véges adathalmazon ( $n$  – minden egyes változó esetében a megfigyelések száma) valósítjuk meg, a numerikus megoldás során egy adatsimító szűrőt alkalmazunk a (71) és (72) egyenletekkel megadott feltételes elvárások helyett. Friedman and Stuetzle (1982) definiált egy szabadon elérhető, pszeudo Fortran nyelven megírt, hatékony adatsimító szubrutint az ACE algoritmus számára. Ennek az algoritmusnak a neve „super smoother”, és tökéletesen használható az ACE algoritmus fentebb leírt transzformációi során (Breiman and Friedman 1985). Egy komplett, az ACE regressziót egy véges adatrendszeren megvalósító szubrutin letölthető a következő honlapról: <http://lib.stat.cmu.edu/general/ace>. Ez a program kód magában foglalja a fentebb nevezett adatsimító algoritmust is. Ezek után egy tényleges regressziós problémára megírt főprogram segítségével az ACE algoritmus nagyon könnyen és hatékonyan megvalósítható.

### ***Szintetikus példa az ACE regressziós algoritmus alkalmazására***

Egy igen egyszerű, kétváltozós adatrendszerre épülő példa segítségével lehet illusztrálni az ACE eljárás hatékony működését. Hogy be lehessen mutatni az ACE eljárás hatékonyságát, egy olyan adatrendszert vizsgáltunk, ahol az adatok közötti optimális transzformáció már előre is ismert volt. A jelen esetben ismertett szintetikus esettanulmány hasonló volt ahhoz, amelyet Breiman and Friedman (1985) is ismertetett az ACE algoritmus alapgondolatának ismertetésénél. 200 adatpárt generáltunk a következő egyenlet alapján:

$$y_j = \exp\left[\sin(2\pi x_j) + \frac{\varepsilon_j}{2}\right] \quad (1 \leq j \leq 200), \quad (75)$$

ahol az egyes  $x_j$  értékeket véletlen szám generátor segítségével egy egyenletes eloszlásból  $U(0,1)$  származtatunk  $U(0,1)$ , míg az  $\varepsilon_j$  értékeket ettől függetlenül egy standard normál eloszlásból  $N(0,1)$  vettük. A 14. ábra mutatja be az ily módon generált  $y_j$  és  $x_j$  ponthalmazt. A 14. ábra alapján igen nehéz lenne meghatározni azt, hogy milyen típusú függvénykapcsolat állhat fenn a vizsgált  $x_j$  független és  $y_j$  függő változók között. Ilyen esetben a hagyományos, paraméteres regressziós vizsgálat alkalmazása szinte lehetetlen, vagy csak félrevezető eredményekre vezethet.



**14. ábra**

A vizsgált, szintetikus módon előállított  $y_j$  és  $x_j$  adathalmaz ( $n=200$ ) az ACE algoritmus tesztelésére.

A (75) egyenlet átrendezése után kaphatjuk az alábbi kifejezést:

$$\ln(y_j) = \sin(2\pi x_j) + \frac{\varepsilon_j}{2}. \quad (76)$$

Ez a kifejezés viszont most már megmutatja a (73) egyenlet által megfogalmazott optimális transzformációt az egyes vizsgált független és függő változók tekintetében (Szucs and Horne 2007).

$$\theta^*(y_j) = ty_j = \ln(y_j) \quad (77)$$

$$\phi^*(x_j) = tx_j = \sin(2\pi x_j) \quad (78)$$

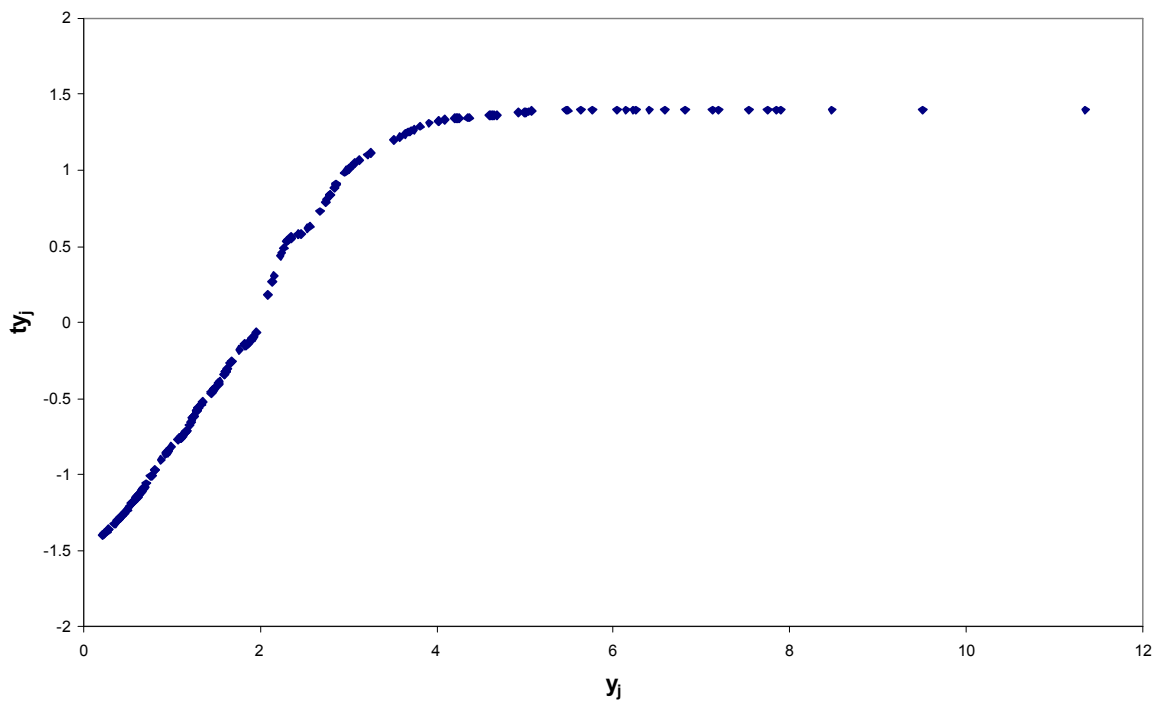
A (77) és (78) egyenleteket behelyettesítve a (76) egyenletbe kapjuk a következő egyenlet- formát:

$$\theta^*(y_j) = \phi^*(x_j) + \frac{\varepsilon_j}{2}. \quad (79)$$

Ezek után az ACE algoritmus segítségével elkészültek a vizsgált változók optimális transzformáltjai. A 15. és 16. ábrákon láthatóak az  $y_j$  függő és az  $x_j$  független változók ACE algoritmus szerinti optimális transzformált értékei. Meggyőző, hogy az ACE algoritmus megtalálta a logaritmus függvényt, mint a függő vagy a válasz változó optimális transzformációját. Hasonló módon meggyőző a sinus függvény transzformáció a független változó esetében. A 17. ábrán találhatóak az összetartozó  $\theta^*(y_j)$  és  $\phi^*(x_j)$  értékpárok. A transzformált változók közötti lineáris kiegyenlítés eredménye az alábbiak szerint alakult:

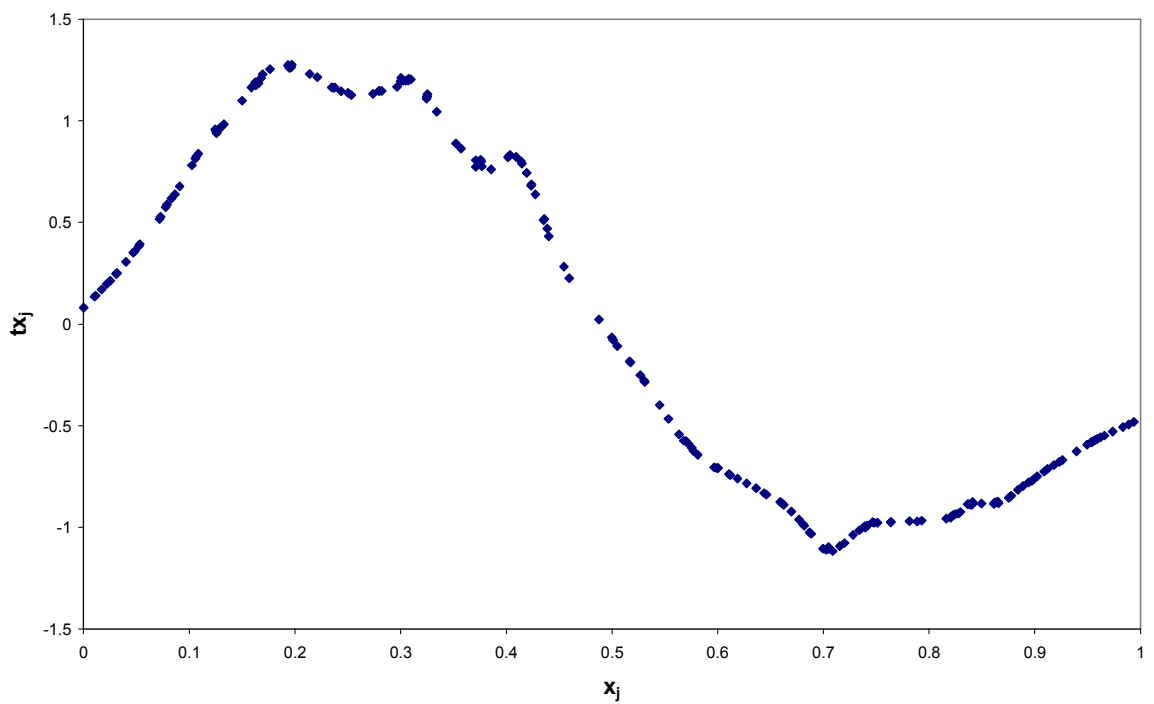
$$\theta^*(y_j) \approx 1.0178\phi^*(x_j), \quad (80)$$

amely nagyon közeli becslése a  $\theta^*(y_j) = \phi^*(x_j)$  kifejezésnek, jelezvén, hogy a kapott ACE transzformált értékek tényleg optimálisak. Megjegyzendő, hogy az ACE transzformált  $y_j$  és  $x_j$  értékekre teljesül a zérus helyparaméter és egységnyi skálaparaméter kívánalom.



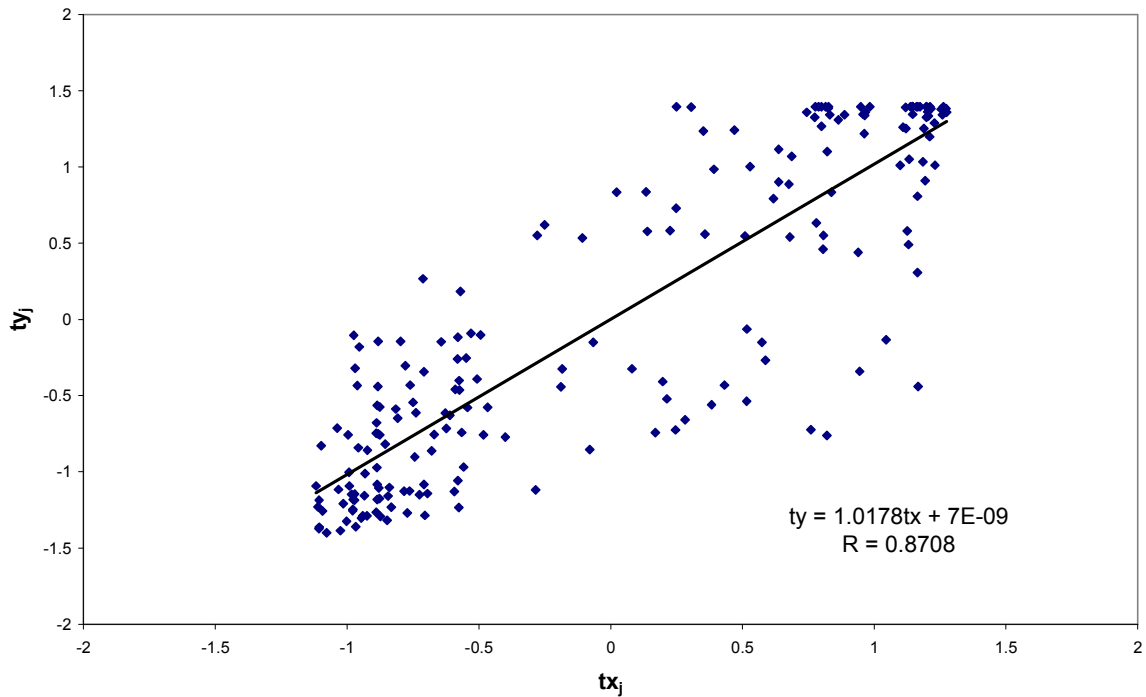
*15. ábra*

Az  $y_j$  függő változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformált értékei.



*16. ábra*

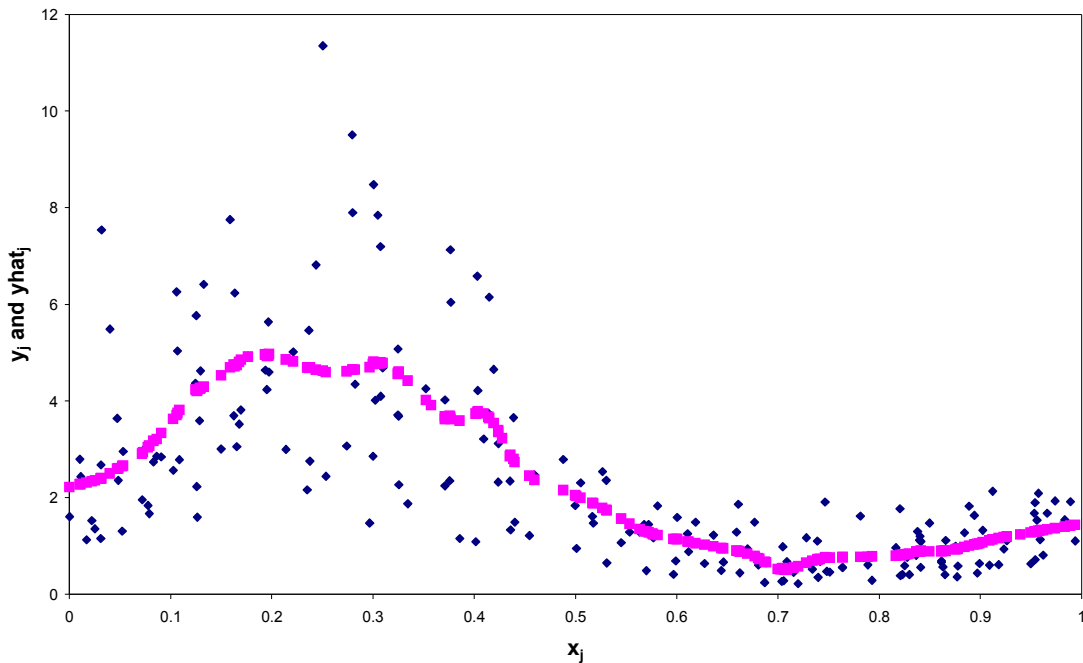
Az  $x_j$  független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformált értékei.



**17. ábra**

Az összetartozó  $\theta^*(y_j)$  és  $\phi^*(x_j)$  érték párok az optimális transzformációt biztosító ACE algoritmus alkalmazása után.

Az ACE transzformált változók közötti korrelációs együttható értéke  $R=0.8708$  (lásd 17. ábra), amely határozottan sokkal jobbnak tekinthető, mint az  $R=0.1549$ , amelyet akkor kapnánk, ha az eredeti  $x_j$  és  $y_j$  változók között hagyományos lineáris kiegyenlítést alkalmaznánk. Azt is fontos megjegyezni, hogy az ACE algoritmus nem produkálhat soha rosszabb eredményt, mint amit a hagyományos lineáris regresszióval kapnánk. Az ACE algoritmus elmélete olyan, hogy ha az eljárás nem talál semmilyen optimális transzformációt, akkor abban az esetben az ACE a független változók lineáris kombinációjaként fogja közelíteni a függő változót. Végezetül a 18. ábra bemutatja az ACE algoritmus által szolgáltatott kiegyenlítési eredményt, amelyet szinte lehetetlen lett volna reprodukálni hagyományos paraméteres regressziós eljárással.



**18. ábra**

Az ACE algoritmus által szolgáltatott optimális regressziós görbe az eredeti  $x_j$  és  $y_j$  kiindulási adatokkal

### 3. 6. Esettanulmányok az ACE algoritmus alkalmazására

#### *Esettanulmány #1: bükki karsztvíz monitoring adatok regressziós vizsgálata*

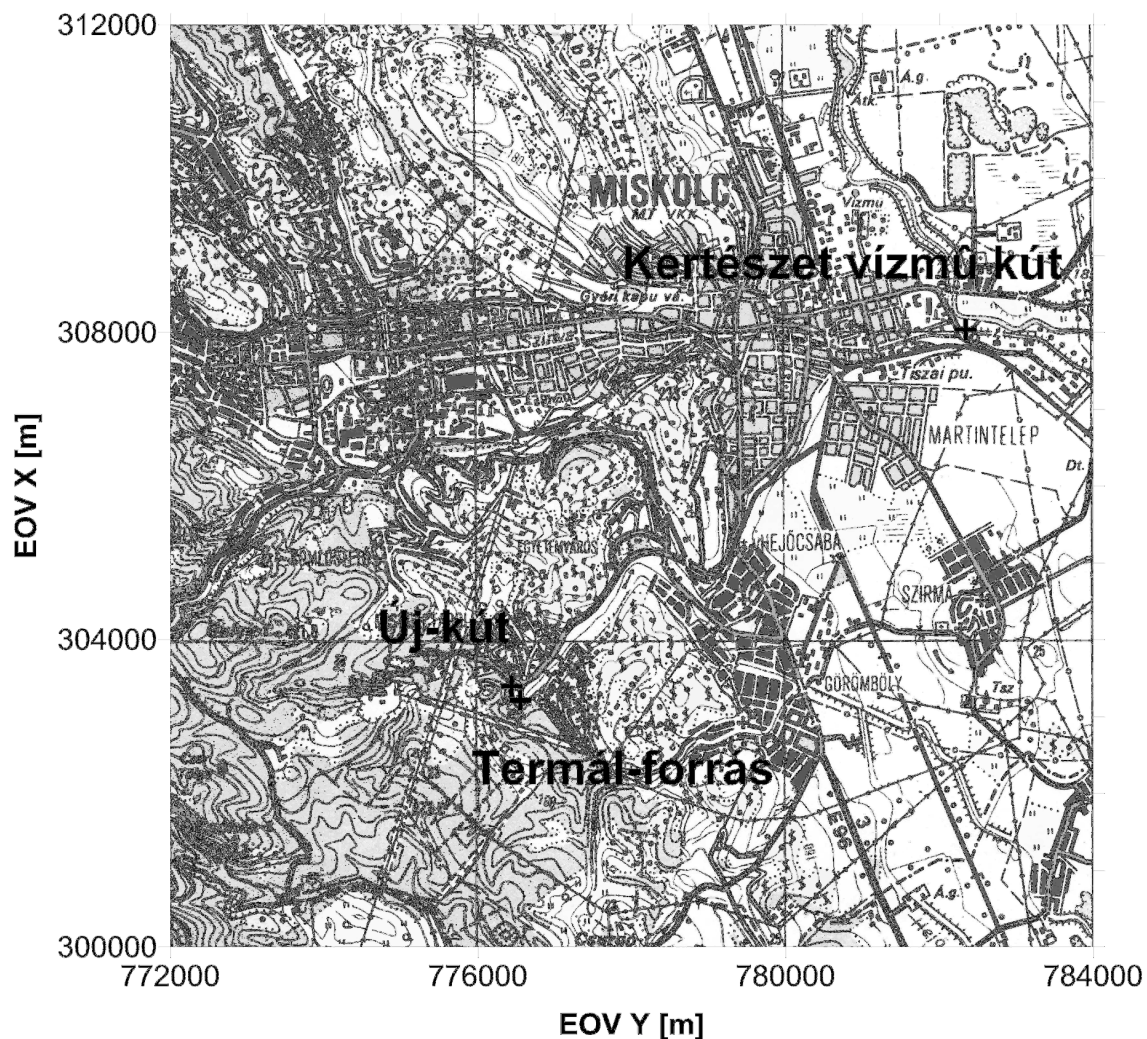
Az első esettanulmány során bükki karsztvíz monitoring adatokat használtunk fel az ACE algoritmus hatékonyságának bemutatására. Az ország harmadik legnagyobb városa, Miskolc mintegy 170000 lakossal a Bükk keleti lábánál fekszik. A város, illetve a környék vízellátásában igen fontos szerepet játszik a bükki karsztvíz. A hideg karsztvíz mellett a hegység peremén megtalálhatjuk a meleg karsztvíz feltöréseket is. Miskolc-Tapolcán például a híres Barlangfürdő és városi vízmű egyik üzeme esetében 100 méteres távolságon belül található a nagy hozamú hideg és meleg vizes karsztforrások. A hévíz regionális áramlási pályák mentén egészen mélyről tör fel a Bükk déli és keleti peremein. A Barlangfürdő meleg vízzel történő ellátását a Termál-forrásra épült kút biztosítja. A Barlangfürdő szomszédságában található vízműtelepen működik ún. Új-kút, amely normál üzemben kb. 30000 m<sup>3</sup>/nap ivóvíz minőségű hideg karsztvizet termel. A Termál-kút látja el a Barlangfürdőt kb. 2700 m<sup>3</sup>/nap vízhozammal.



Nyilvánvaló, hogy Miskolc-Tapolcán a Bükk lábánál egymás közelébe kerültek a hideg és meleg vizes áramlási rendszerek, ahol egyensúly szempontjából egy igen érzékeny hidraulikai rendszer jött létre.

Az említett kutak Miskolc EOV koordinátákkal rendelkező térképlapján elhelyezve a *19. ábrán* láthatóak. A térképen az említett két kút mellett látható még a Kertészeti vízmű kút is, amely szintén szerepelt a későbbiekben ismertetett komplex regressziós vizsgálatban. Az utóbbi időben sajnos egyre gyakrabban fordul elő a Termál-forrás vízének hőmérséklet ingadozása és csökkenése, amely a Barlang-fürdő hosszú távú üzemelését komolyan befolyásolhatja. A Termál-forrás és a közelében elhelyezkedő Új-kút vízszintjei közötti korrelációt már viszonylag régen feltételezik a hidrogeológus szakemberek. Mind a két helyen egyébként rendszeres monitoring méréseket hajt végre a Miskolci Egyetem Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszéke Dr. Lénárt László kolléga vezetésével. A vízszintek mellett például a hozam és hőmérséklet viszonyok is mérésre kerülnek. A Barlang-fürdőben várható vízszint és hőmérséklet viszonyok előrejelezhetősége érdekében komplex hidrogeológiai többváltozós regressziós vizsgálatot hajtottunk végre a Termál-forrás, az Új-kút és a Kertészeti-kút monitoring adatainak felhasználásával. A Miskolc keleti szélén található Kertészeti-kút kb. 8 km távolságban található észak-kelet irányban a tapolcai kutaktól. A mintegy 460 méter mélységben szűrőzött Kertészeti-kút a város azon a részén már több száz méter üledék összlettel fedett karszt rendszerből termel hévizet. A korábbi vizsgálatok már bizonyították, hogy a Kertészeti-kút is a Bükk felől kapja az utánpótlódását regionális nagymélységű áramvonalpályák mentén. Bár a vizsgálatokba bevont kutak közötti hidraulikai kapcsolat is régóta ismert, a hagyományos többváltozós kiegyenlítési eljárások nem tudtak megfelelő pontosságot elérni a különböző előrejelzési és korrelációs vizsgálatokban (Kovács és Székely 1998). Ebben tudományos és gyakorlati szempontból is fontos és érdekes hidrogeológiai vizsgálatban azonban az ACE algoritmus alkalmazásával sikerült jelentős növekedést elérni mind a megbízhatóság, mind pedig a pontosság tekintetében.

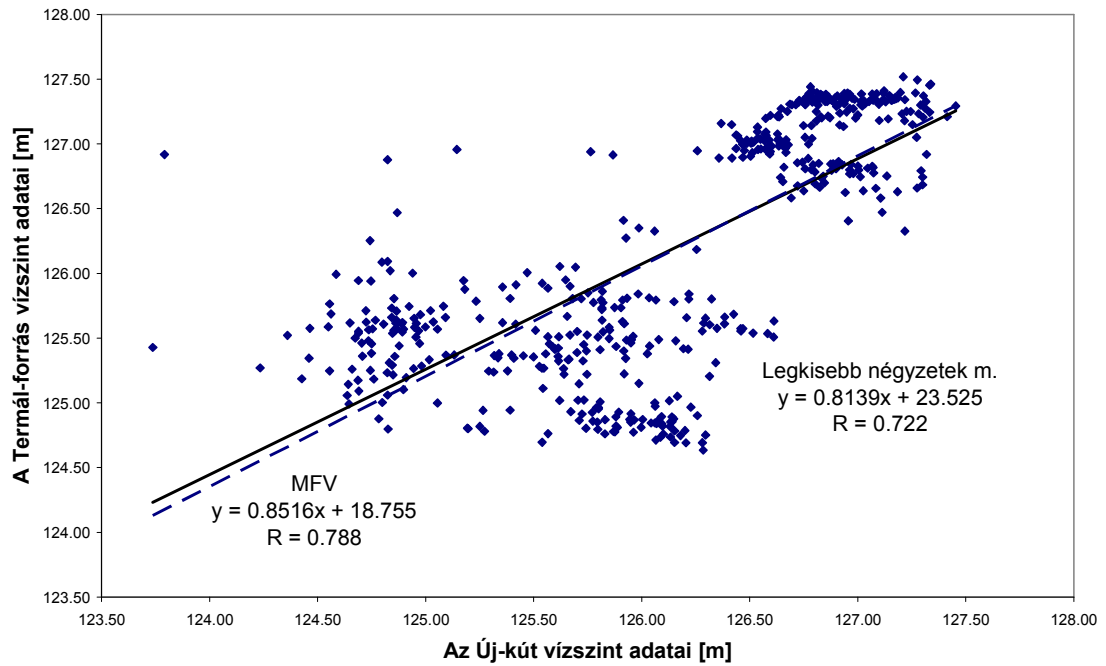
Először a Termál-forrás vízszint adatait hasonlítottuk össze a közelben lévő Új-kút, és a jóval távolabb lévő (bár a hidraulikai kapcsolat meglétét szintén feltételező) Kertészeti-kút vízszint adataival.



**19. ábra**

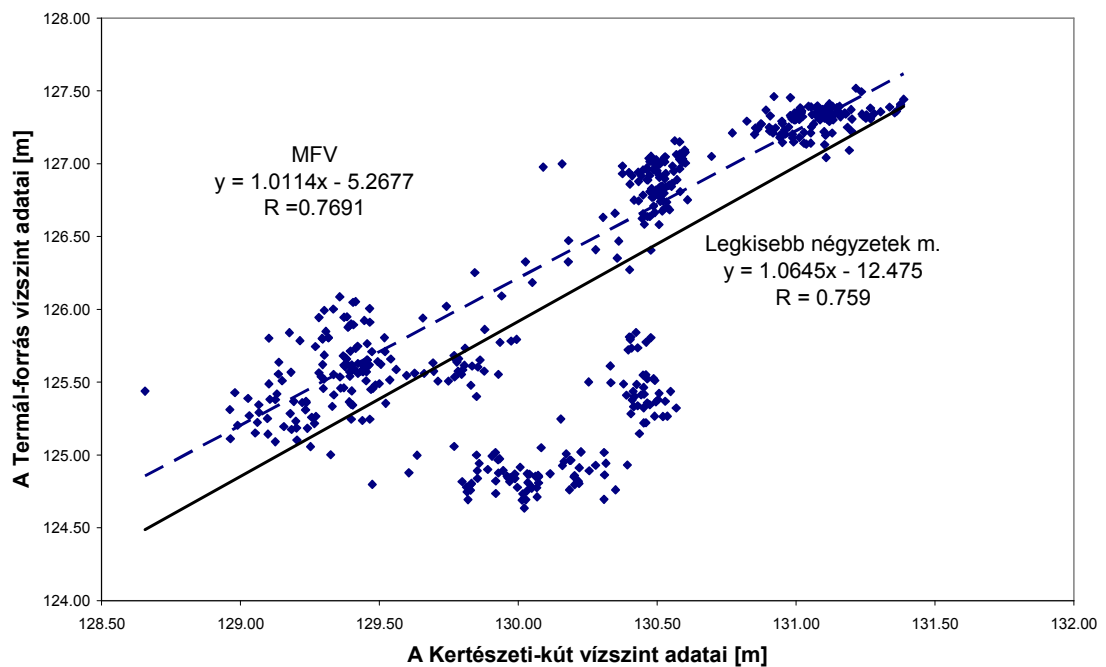
A komplex hidrogeológiai vizsgálatba bevont monitoring kutak elhelyezkedése Miskolcon.

Hasonló hosszúságú adatsorokat vizsgáltunk egy megadott időintervallumban. Mindegyik kút esetében a mérési adatok száma (n) 551 volt. A mérési adatok, illetve a legkisebb négyzetes, valamint a leggyakoribb érték elve szerinti kiegyenlítés eredményei és főbb jellemzői a 20. és 21. ábrákon láthatóak. Megállapíthatjuk, hogy a 20. ábra esetében a különböző kiegyenlítési eljárások nagyon hasonló eredményt szolgáltattak a mérési adatok felhasználásával. A második esetben (lásd 21. ábra) a kiegyenlítési eljárások eredményei között nagyobb különbség fedezhető fel. Az egyes kutakban mért adatok közötti kapcsolat tisztán felismerhető, de az is világos, hogy az alkalmazott egyszerű, két kút vízszint adataira épülő lineáris kiegyenlítés nem vezet kielégítő eredményre, amelyet a kiegyenlítések eredményéül adódó regressziós együtthatók is megerősítenek.



20. ábra

Lineáris regressziós vizsgálat a Termál-forrás és az Új-kút vízszint adatai között.



21. ábra

Lineáris regressziós vizsgálat a Termál-forrás és a Kertészeti-kút vízszint adatai között.

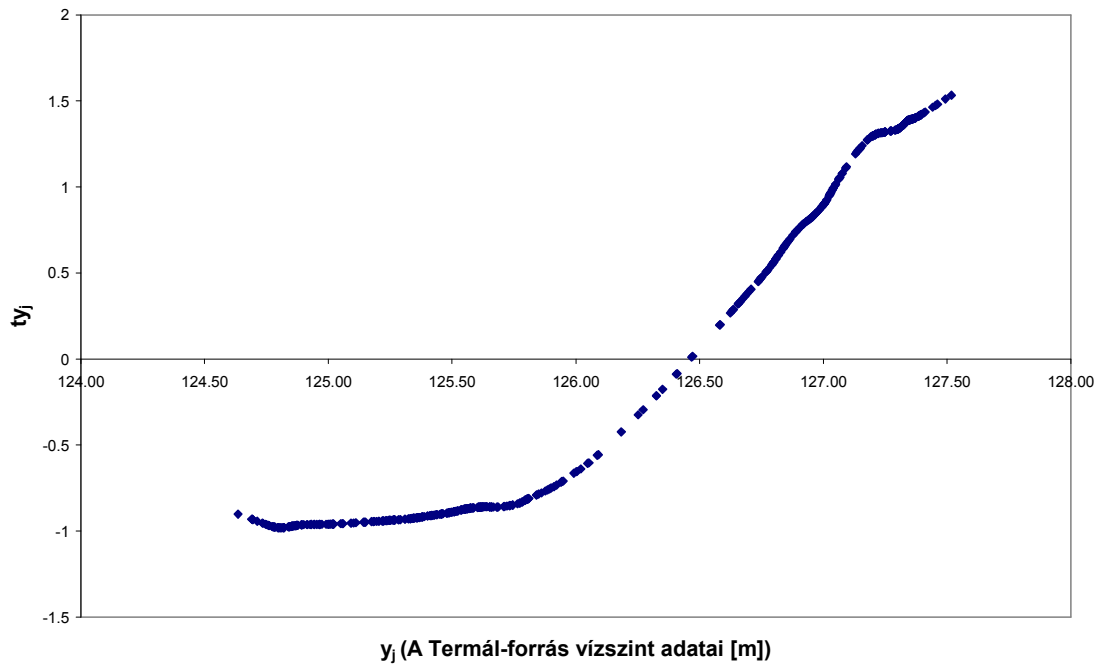
A továbbiakban a vízszint adatok mellett egyéb típusú adatokat (pl. vízhőmérsékleti és hozam adatok a Termál-forrásból) is felhasználtunk annak érdekében, hogy a Termál-forrás vízszint adatait pontosabban tudjuk közelíteni egy többváltozós lineáris regressziós összefüggés segítségével. Sajnos a változók számának növelésével a regressziós kapcsolat pontosságát nem tudtuk érdemben növelni. Ez a tény természetesen arra is felhívta a figyelmet, hogy a választott lineáris többváltozós regressziós modell nem képes megfelelően leírni a vizsgált változók között vélhetően fennálló kapcsolatot a komplex vízföldtani viszonyokkal jellemezhető karsztrendszerben (Lénárt, Kovács, Horányiné Csiszár, Szűcs 2006).

Ezért a következő lépésként az ACE algoritmust alkalmaztuk ugyanannak az adatrendszernek a vizsgálatára, hogy növelni tudjuk a becslések pontosságát és megbízhatóságát. Ebben az esetben is a Termál-forrás tengerszint feletti magasságban mért vízszint adatait tekintettük az  $y$  függőváltozónak. Az ACE algoritmus alkalmazásával ki tudtuk választani azt a négy független változót, amelyek segítségével a legjobban közelíthető volt az  $y$  függő változó értéke:  $x_1$  az Új-kút vízszint adatai [m],  $x_2$  a Termál-forrás vízhőmérsékleti adatai [Celsius],  $x_3$  a Termál-forrás napi termelési hozam adatai [ $\text{m}^3/\text{nap}$ ] és  $x_4$  a Kertészeti-kút vízszint adatai [m]. Az összehasonlítás kedvéért ugyanezekkel a változókkal ( $y$  és  $x_1, x_2, x_3$ , valamint  $x_4$ ) végrehajtottuk a hagyományos többváltozós lineáris kiegyenlítést is mind a legkisebb ( $L_2$ -norma), mind pedig a leggyakoribb érték (P-norma) módszerével. A kapott eredményeket az alábbiakban tárgyaljuk részletesen.

A 22-26. ábrák mutatják be az ACE algoritmussal származtatott optimális transzformáltakat az egyes vizsgált  $y_i, x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}$  és  $x_{4j}$  változók esetében. A 27. ábrán pedig a transzformált függő változó értékeit tekinthetjük meg a 4 független változó transzformáltjainak összege függvényében. Az ACE transzformált térben a lineáris regresszió a következő eredményre vezetett:

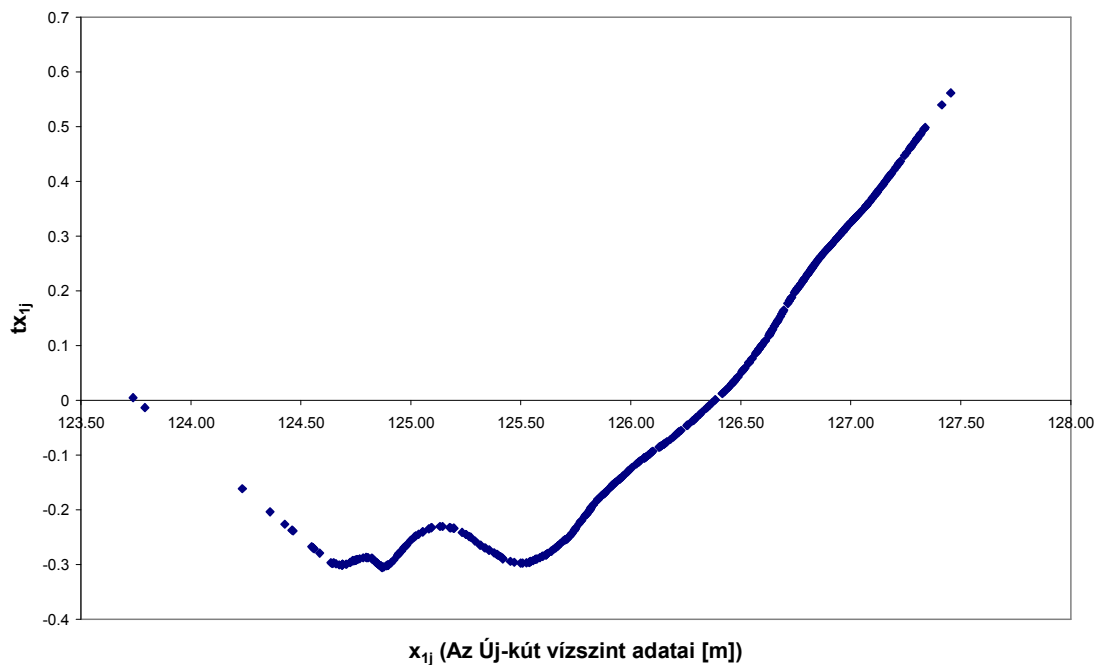
$$\theta^*(y_j) = 1.0026 \left[ \phi_1^*(x_{1j}) + \phi_2^*(x_{2j}) + \phi_3^*(x_{3j}) + \phi_4^*(x_{4j}) \right], \quad (81)$$

igen jó korrelációs tényező értékkel ( $R=0.993$ ), amely sokkal magasabb, mint amelyeket a hagyományos többváltozós lineáris kiegyenlítő eljárások során kaptunk (lásd 20. és 21. ábrák).



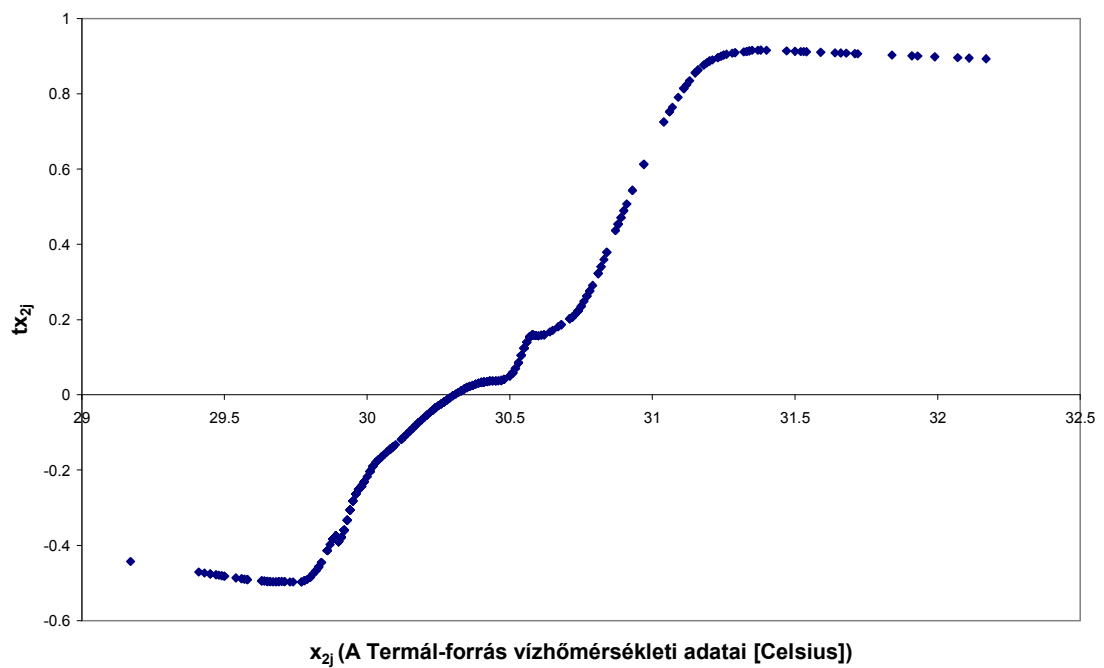
22. ábra

Az  $y_j$  függő változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.



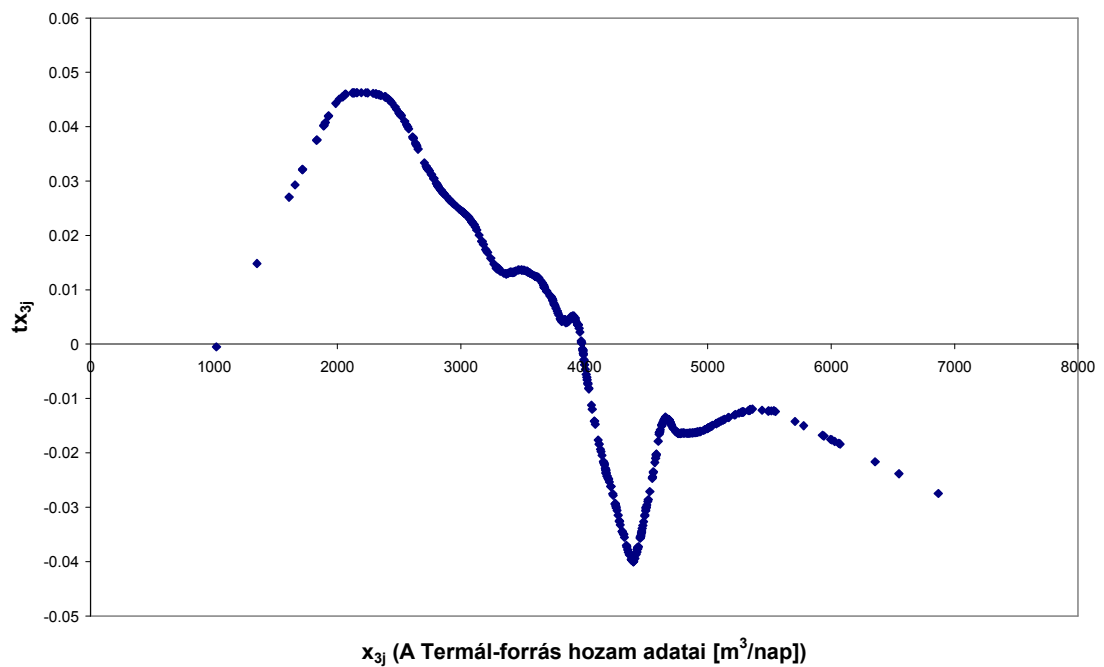
23. ábra

Az  $x_{1j}$  független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.



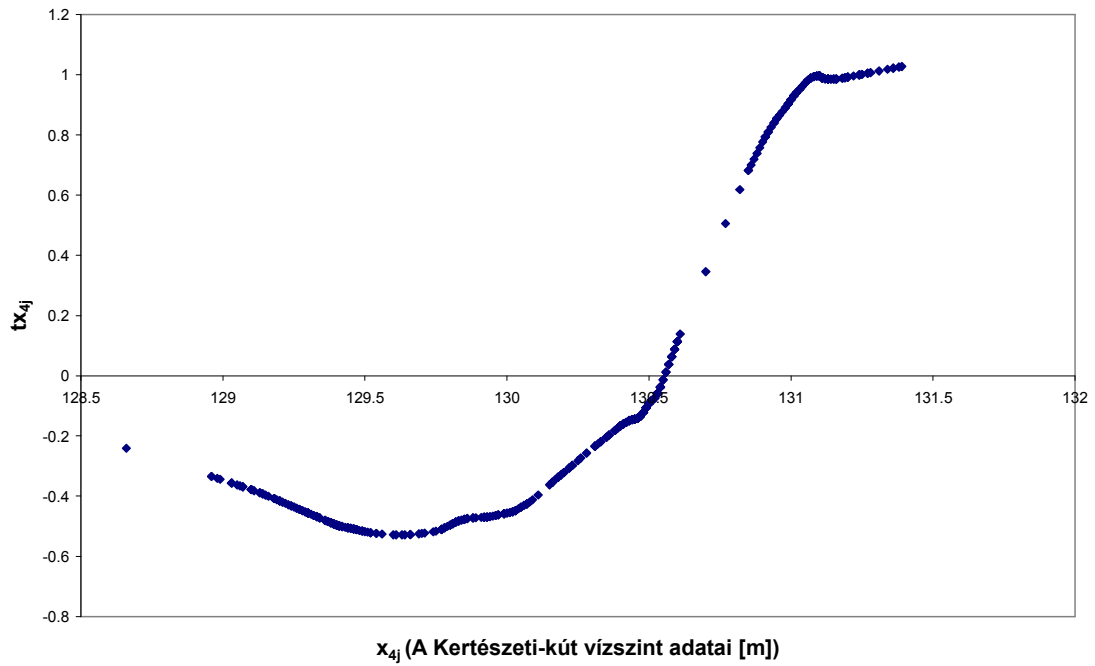
24. ábra

Az  $x_{2j}$  független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.



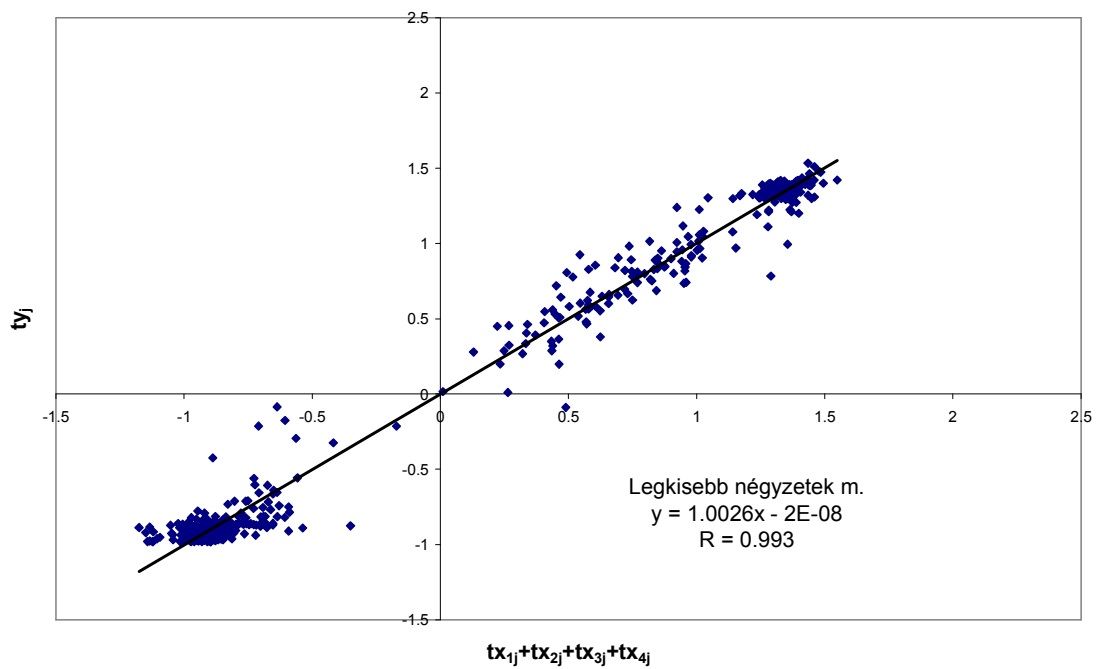
25. ábra

Az  $x_{3j}$  független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.



**26. ábra**

Az  $x_{4j}$  független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.



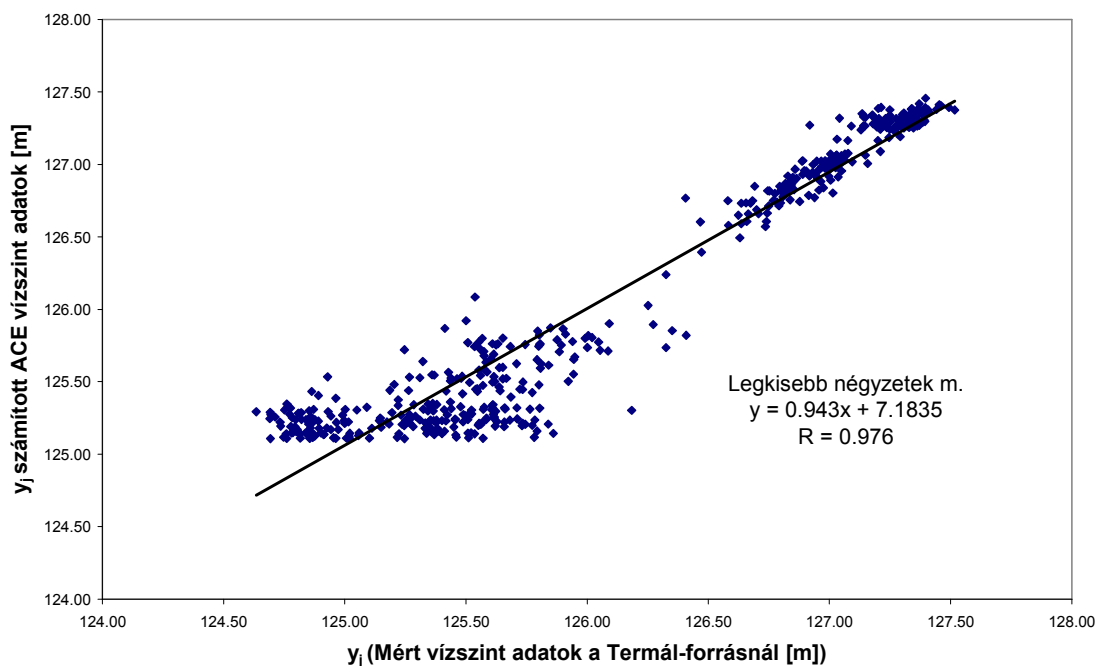
**27. ábra**

A transzformált függő változó értékei ( $ty_j$ ) a 4 független változó transzformáltjainak összege függvényében.

Végül az ACE algoritmus eredményeinek felhasználásával előállíthatjuk a nem-paraméteres regresszió alapján számított vízszint értékeket a Termál-forrás esetében az alábbi egyenlet felhasználásával:

$$y_j^{cal} = \theta^{*-1} \left[ \phi_1^*(x_{1j}) + \phi_2^*(x_{2j}) + \phi_3^*(x_{3j}) + \phi_4^*(x_{4j}) \right], \quad (82)$$

ahol  $y_j^{cal}$  jelöli a a becsült vízszint adatokat a ténylegesen mért adatok alapján ( $x_{1j}$ ,  $x_{2j}$ ,  $x_{3j}$  and  $x_{4j}$ ). A Termál-forrás esetében a 28. ábra mutatja be a mért és az ACE algoritmus alapján számított vízszint adatok összehasonlítását. Az összetartozó pontpárok elhelyezkedése és a korrelációs tényező értéke alapján megállapíthatjuk, hogy az ACE algoritmus segítségével hatékony regressziós kapcsolat állítható fel a vizsgált változók között.



**28. ábra**

A mért és az ACE algoritmus alapján számított vízszint adatok összehasonlítása a Termál-forrás esetében.

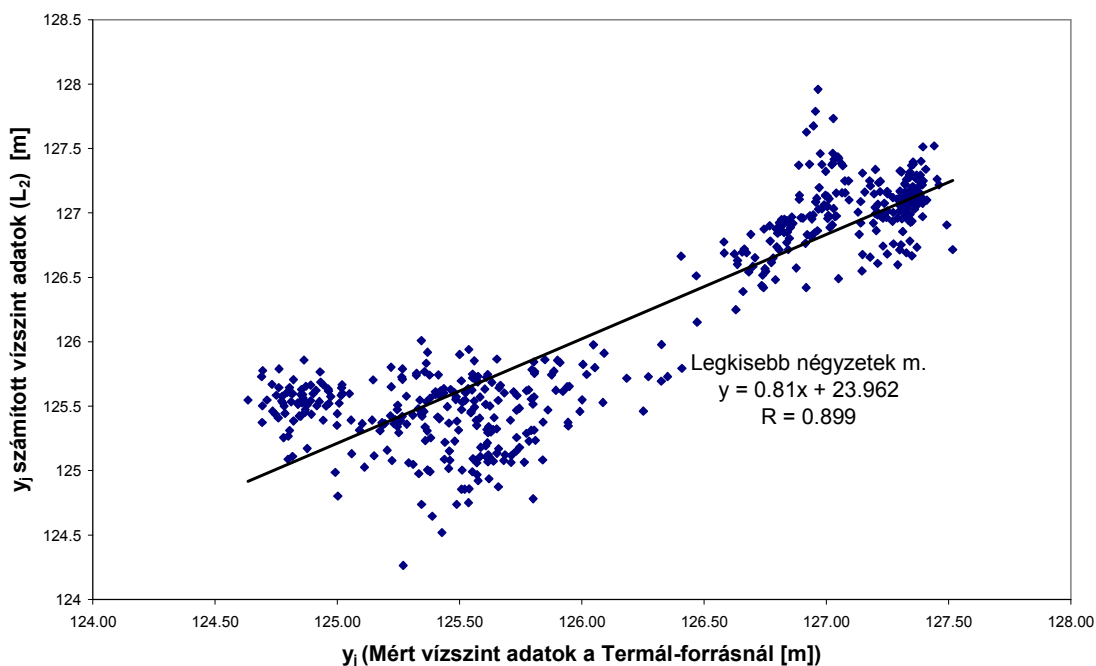
Az alkalmazott regresszió vizsgálatok megbízhatóságának a jellemzésére bevezethetjük az alábbi gyakran alkalmazott kifejezést a mért és a számított vízszintek különbségének



a jellemzésére. Az RMSE („root mean square error”) hibajellemző a következő kifejezéssel adható meg.

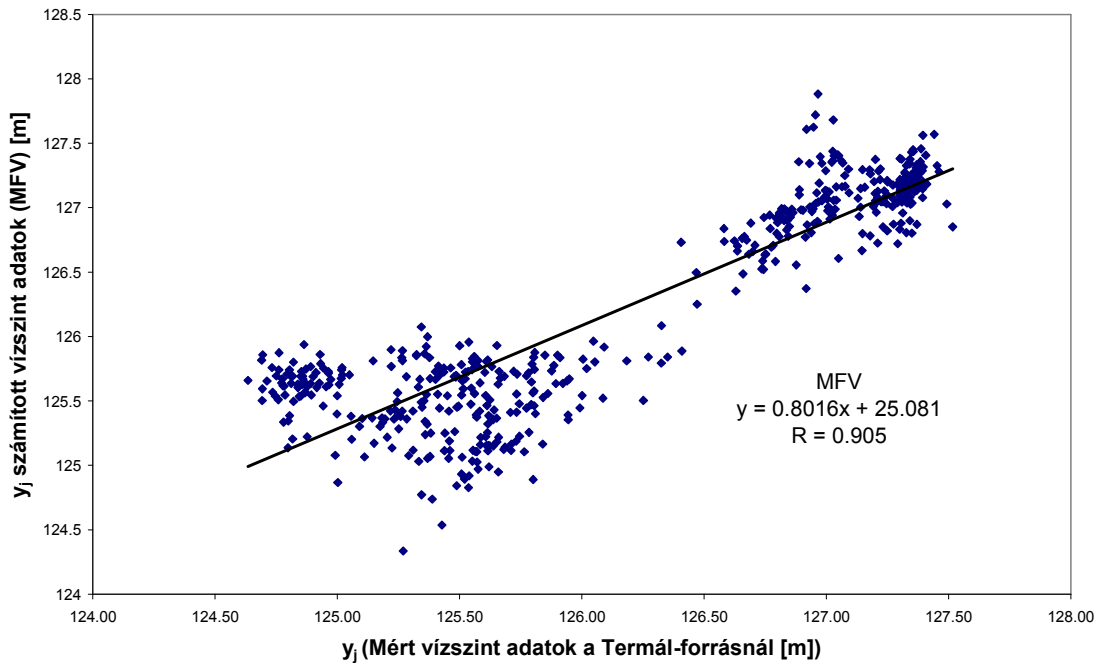
$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_j - y_j^{cal})^2} . \quad (83)$$

Az ACE algoritmus alkalmazása esetében a Termál-forrás mért és számított vízszintjei esetében az RMSE értéke 0.2311 méter volt. A vizsgált változók ( $y$  és  $x_1, x_2, x_3$  és  $x_4$ ) regressziós analízisét természetesen elvégeztük a hagyományos többváltozós regresszió alkalmazásával is mind a legkisebb négyzetek módszere, mind pedig a leggyakoribb értékek módszere felhasználásával. Ezeknek a vizsgálatoknak az eredményei a 29. és 30. ábrákon láthatóak. A legkisebb négyzetes többváltozós lineáris regresszió esetében az RMSE értéke 0.4052 méter volt, míg az MFV regresszió esetében az RMSE nagyságára 0.3826 méter adódott.



**29. ábra**

A mért és a legkisebb négyzetes többváltozós lineáris regresszió alapján számított vízszint adatok összehasonlítása a Termál-forrás esetében.



**30. ábra**

A mért és a leggyakoribb értékek elvére épülő többváltozós lineáris regresszió alapján számított vízszint adatok összehasonlítása a Termál-forrás esetében.

A kapott regressziós egyenletek a hagyományos vizsgálat esetében az alábbiak voltak:

$$y_j^{cal} = 0.2628x_{1j} + 0.7366x_{2j} - 0.0019x_{3j} + 0.5277x_{4j} + 2.6705 \quad (L_2), \quad (84)$$

$$y_j^{cal} = 0.2775x_{1j} + 0.6622x_{2j} - 0.0017x_{3j} + 0.5617x_{4j} - 1.3646 \quad (MFV). \quad (85)$$

Összehasonlítva a 28-30. ábrákat és a számított RMSE értékeket megállapíthatjuk, hogy az ACE algoritmus meggyőző eredményeket szolgáltatott egy olyan komplex hidrogeológiai karsztrendszer adatainak vizsgálatánál, ahol a hagyományos regressziós vizsgálatok már nem tudnak megfelelő eredményeket produkálni.

***Esettanulmány #2: Egy fülöp-szigeti geotermikus mező termelési adatainak komplex sokváltozós regressziós vizsgálata***

A Fülöp-szigeteken az ország teljes elektromos áram termelésének mintegy 27 %-a származik geotermikus energia hasznosításából. A Stanford University Department of

Energy Resources Engineering intézménnyel történt együttműködés keretében a második esettanulmányban egy Fülöp-szigeteken található geotermikus mező (Palinpinon-I) különböző termelési adatainak (klorid koncentráció és besajtolási hozamok) vizsgálatára alkalmaztuk az ACE algoritmust. A vizsgálat egyik fő célja volt, hogy tisztázni lehessen a termelő és besajtoló kutak közötti hidraulikus vezetőképességi viszonyokat. A vizsgált geotermikus tároló első részletesebb feldolgozását Sullera and Horne (1999) cikkében találhatjuk meg. Munkájuk egyik fő konklúziója az volt, hogy a többváltozós lineáris regressziós modell nem ad kielégítő eredményt a termelő kutakban mért klorid koncentráció és a besajtoló kutak hozam adatai között fennálló kapcsolatok leírására. Sullera and Horne (1999) megállapította, hogy ha sikerülne megtalálni a vizsgált változók közötti nem-lineáris kapcsolat jellegét, akkor jelentős előrelépést lehetne tenni a vizsgált mező működésének értelmezésében.

Ezen előzmények miatt választottuk második esettanulmányként ezt az igen érdekes példát az ACE algoritmus vizsgálatára. Az ACE módszer hatékony működésének demonstrálásra két termelő kutat (OK-7D és PN-31D) választottunk ki, amelyekben a klorid koncentráció értékeket monitoring jelleggel mérték. A kilenc besajtoló kút esetében rendelkezésre álltak a hozam adatok. A vizsgálataink során most is volt egy függő változónk (név szerint a klorid koncentráció a vizsgált termelő kútban) és emellett 9 db független változónk (a különböző besajtolási hozamok). Második vizsgálati alternatívaként bevontunk egy idő ( $t$ ) változót is, mint független változót. Már Sullera and Horne (1999) felhívta arra a figyelmet, hogy érdemes 10. független változóként az időt szerepeltetni a regressziós vizsgálatban.

Ezek után került sor az ACE algoritmus használatára a nevezett változókkal. Ebben az esetben is két különböző kiegyenlítési alternatívát vizsgáltunk. Először 9 majd 10 független változó alkalmazásával végeztük el számításainkat. Célunk hasonló volt, mint a korábbi vizsgálatoké. Szerettük volna megtalálni a legjobb kapcsolatot a mért klorid koncentráció ( $y_j$ ) értékek [ppm] és a besajtolási hozamok ( $x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}, x_{4j}, x_{5j}, x_{6j}, x_{7j}, x_{8j}, x_{9j}$ ) adatai [kg/s], illetve az eltelt  $t$  idő ( $x_{10j}$ ) [év] között. Az ACE algoritmus által származtatott eredményeket összehasonlítottuk a korábbi hagyományos regressziós vizsgálat (Sullera and Horne, 1999) eredményeivel. Az ACE algoritmus alkalmazásával jelentősen javultak a statisztikai paraméterek, úgy mint az RMSE és regressziós

koefficiens értékek. A 2. táblázatban találhatóak az összehasonlító vizsgálat alapján kapott fontosabb statisztikai eredmények.

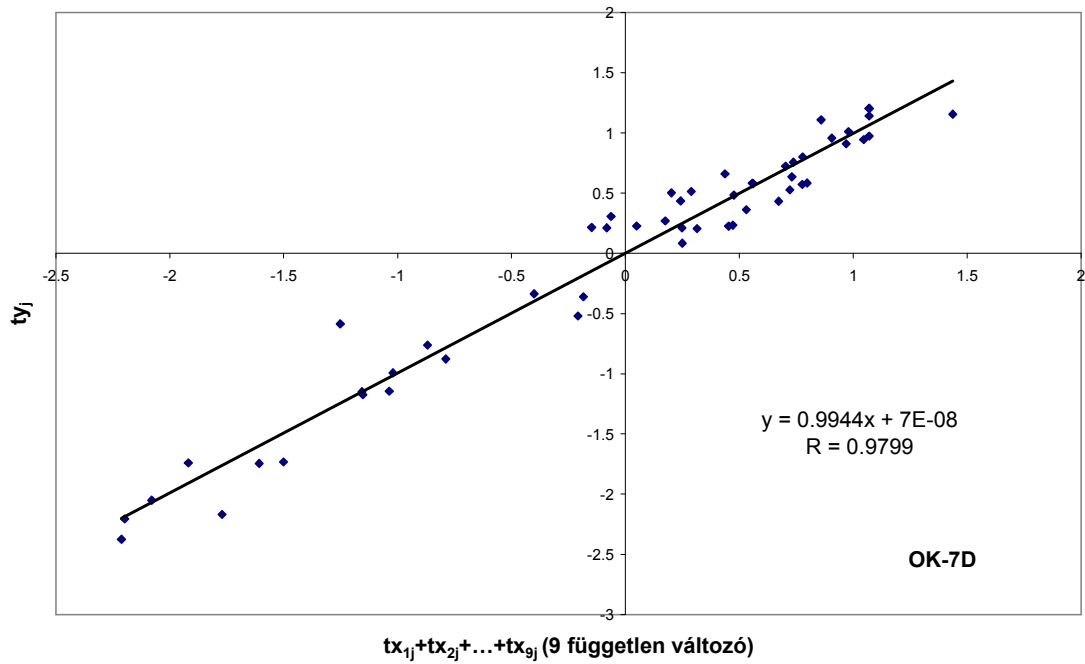
Vizsgált termelő kút	A vizsgálatba bevont független változók száma	Többváltozós lineáris regresszió (legkisebb négyzetek m.)	ACE algoritmus
OK-7D	9	RMSE = 643.69	RMSE = 278.34
		R=0.8850	R=0.9777
	10	RMSE = 294.80	RMSE = 145.12
		R=0.9775	R=0.9993
PN-31D	9	RMSE = 659.57	RMSE = 256.32
		R=0.7905	R=0.9781
	10	RMSE = 253.81	RMSE = 107.14
		R=0.9726	R=0.9943

## 2. táblázat

Az OK-7D és PN-31D termelő kutakra végzett kiegyenlítési eljárások fontosabb statisztikai eredményei.

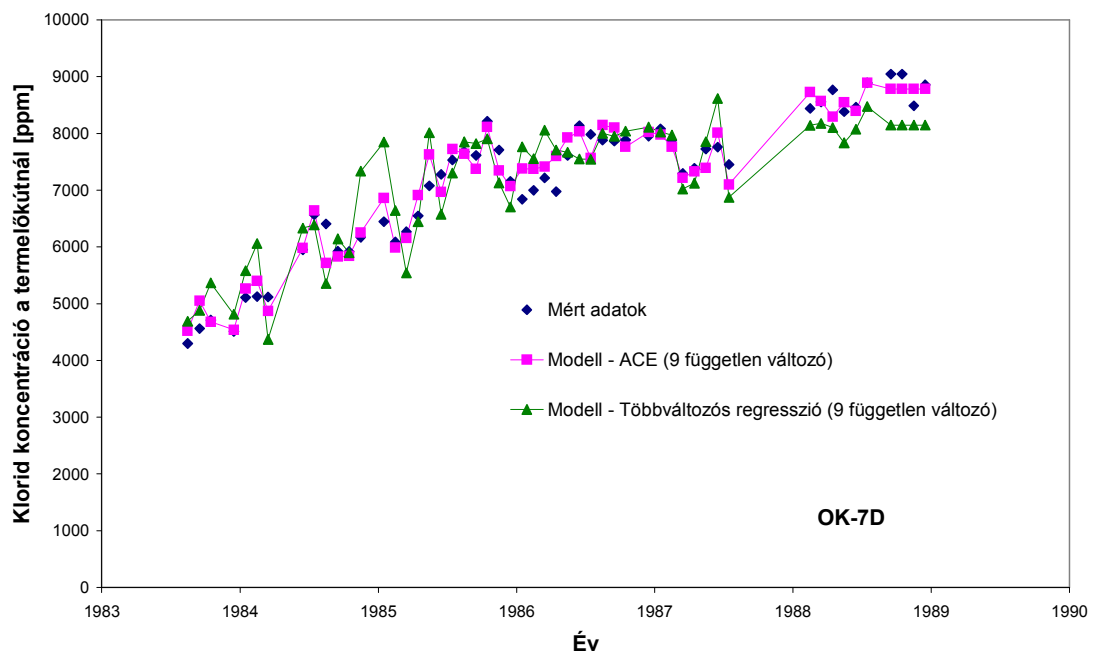
A 2. táblázat számszerű adatai mellett a 31-38. ábrák is bizonyítják az ACE algoritmus előnyeit a hagyományos többváltozós regressziós vizsgálattal szemben. A 31., 33., 35. és 37. ábrákon láthatjuk a vizsgált  $y_j$  függő változó optimális transzformált értékeit a 9 vagy tíz független változó transzformált értékeinek összege ellenében az OK-7D és a PN-31D termelő kutak esetében. Teljesen világos a nevezett ábrák alapján, hogy a kapott optimális transzformált változók szinte majdnem tökéletesen kielégítik az ACE algoritmus alapkövetelményét, azaz:

$$\theta^*(y_j) = \sum_{i=1}^p \phi_i^*(x_{ij}), \quad \text{ahol } p=9 \text{ vagy } 10. \quad (86)$$



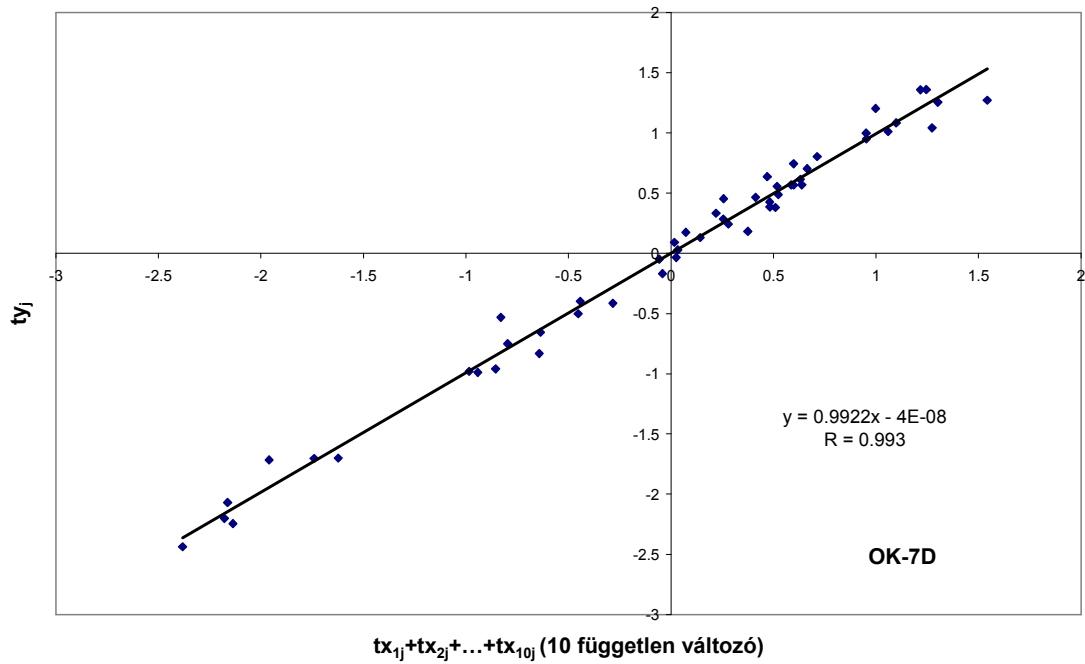
31. ábra

Az  $y_j$  függő változó optimális transzformáltja a 9 ACE transzformált független változó összegének függvényében (OK-7D termelőkút).



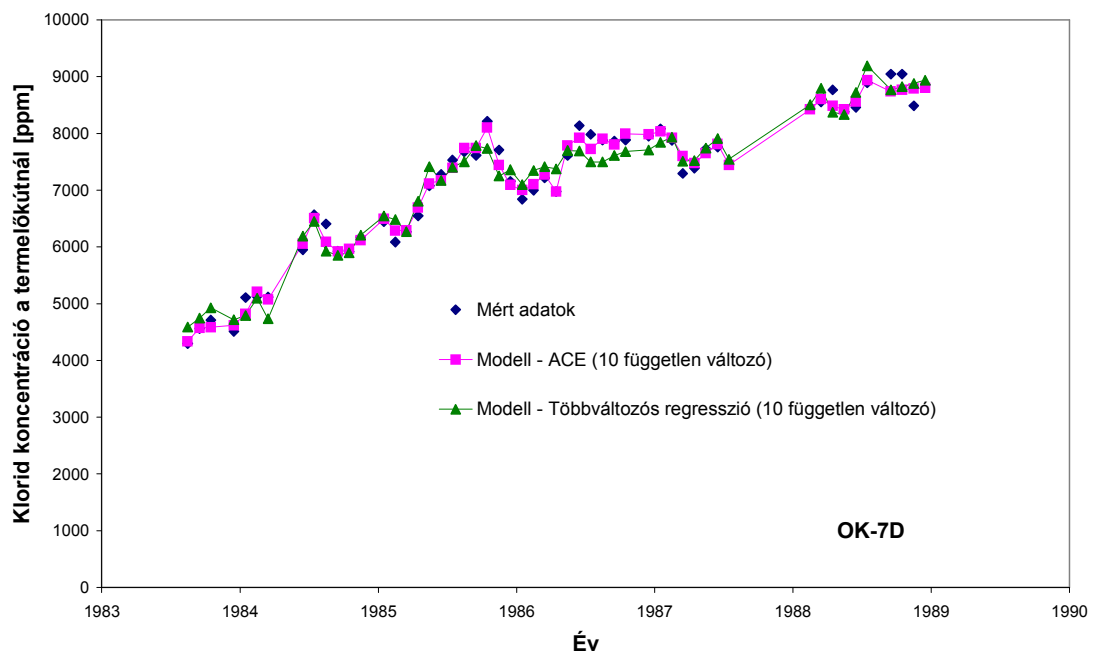
32. ábra

A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (OK-7D termelőkút, 9 független változó).



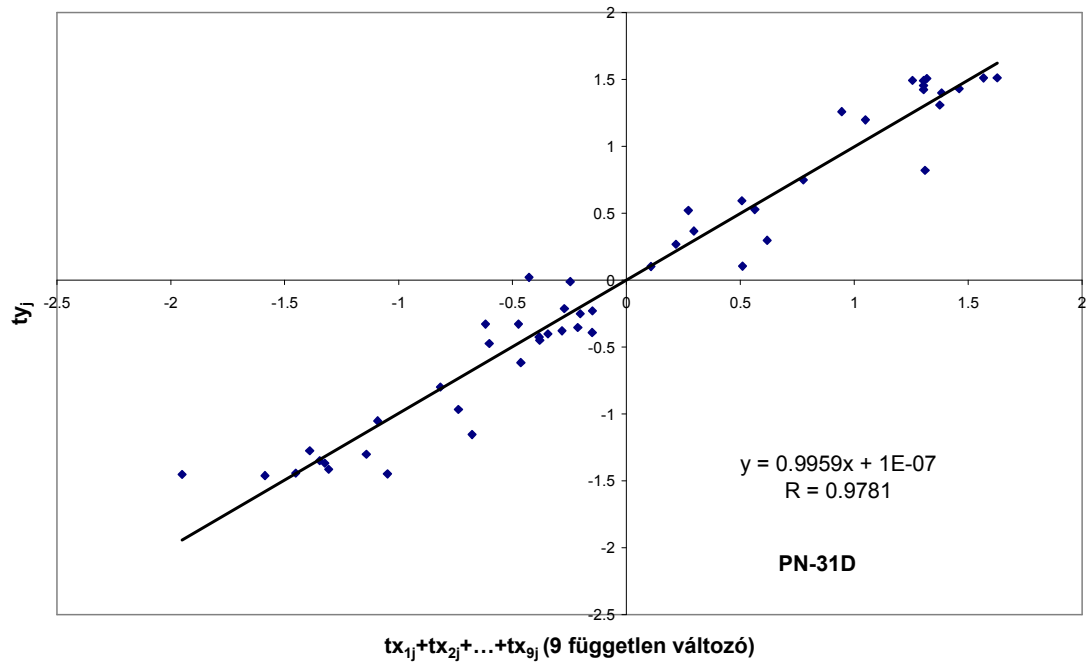
33. ábra

Az  $y_j$  függő változó optimális transzformáltja a 10 ACE transzformált független változó összegének függvényében (OK-7D termelőkút).



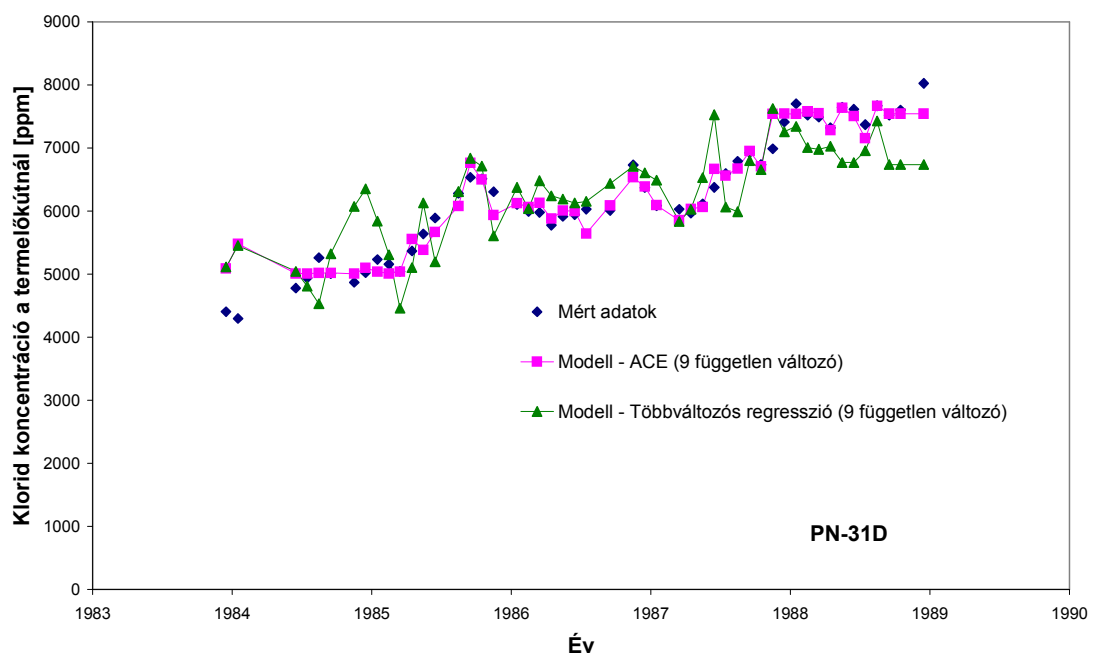
34. ábra

A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (OK-7D termelőkút, 10 független változó).



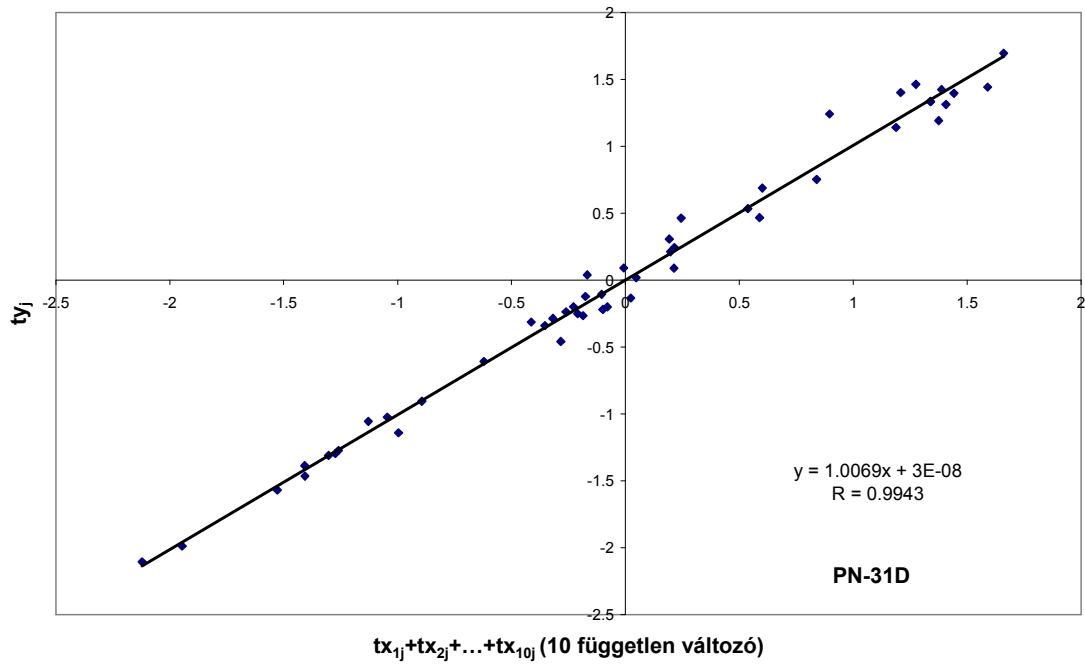
35. ábra

Az  $y_j$  függő változó optimális transzformáltja a 9 ACE transzformált független változó összegének függvényében (PN-31D termelőkút).



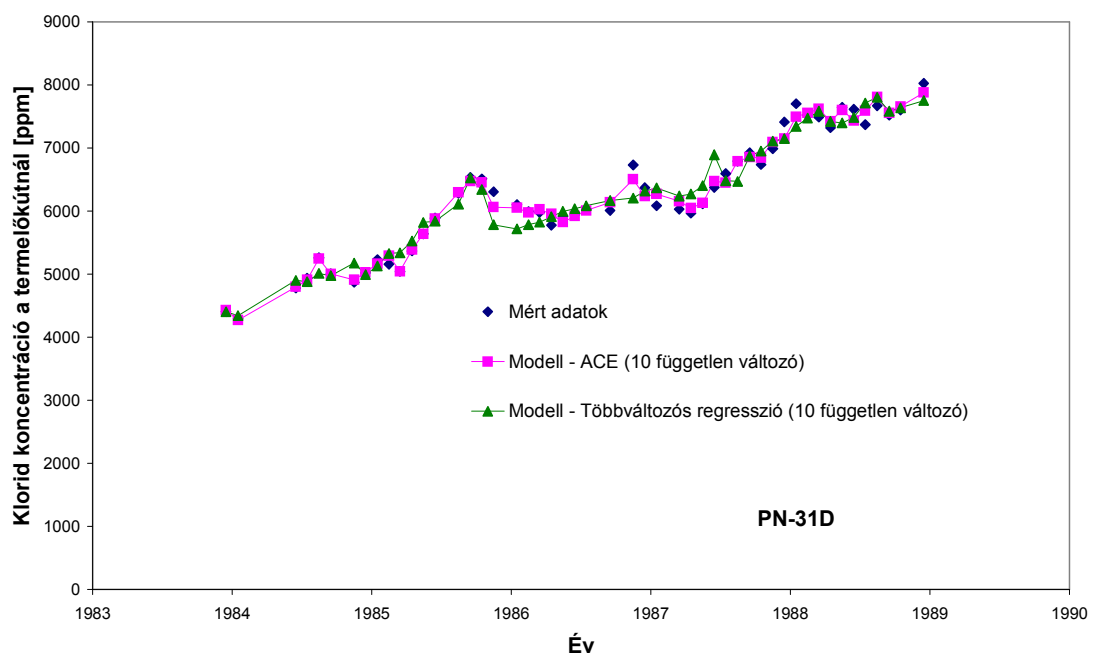
36. ábra

A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (PN-31 termelőkút, 9 független változó).



37. ábra

Az  $y_j$  függő változó optimális transzformáltja a 10 ACE transzformált független változó összegének függvényében (PN-31D termelőkút).



38. ábra

A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (PN-31 termelőkút, 10 független változó).



A számított vagy becsült klorid koncentráció adatokat az ACE algoritmus alábbi inverziós formulájából kaphatjuk meg:

$$y_j^{cal} = \theta^{*-1} \left[ \sum_{i=1}^p \phi_i^*(x_{ij}) \right], \text{ ahol } p=9 \text{ vagy } 10. \quad (87)$$

A 32., 34., 36. és 38. ábrákon a mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek láthatók az idő függvényében két kiválasztott termelő kút esetében (OK-7D vagy PN-31) 9 vagy 10 független változó alkalmazásával. A nevezett ábrákról jól megállapítható, hogy ACE algoritmus által kapott eredmények minden esetben közelebb álltak a mért adatokhoz, mint amelyeket a hagyományos többváltozós regresszió alkalmazásával adódtak.

A 2. táblázat statisztikai eredményei, illetve a 32., 34., 36. és 38. ábrák alapján a következő megállapítás nyerhető. Az időnek (t), mint 10. független változónak a szerepeltetése növelte a regressziós számítás megbízhatóságát és pontosságát mind a többváltozós lineáris, mind pedig az ACE algoritmus esetében. Másrészt az is látható, hogy ennél a komplex hévíztározó problémánál, ahol a vizsgált változók közötti tényleges kapcsolatok nem igazán sejthetőek előre, az ACE algoritmus segítségével minden esetben jobb illeszkedési eredményeket értünk el. Az ACE algoritmus alkalmazásával elértük az egyik kitűzött célt, hogy jobban le tudjuk írni egy vizsgált fülöp-szigeteki hévíztároló rendszer (Palinpinon-I) termelő és besajtoló kútjai közötti hidraulikus kapcsolat jellegét monitoring jelleggel mért termelési adatok felhasználásával.

### ***Esettanulmány #3: Repedezett hévíztárolók vezetőképességi viszonyainak meghatározása az ACE algoritmus alkalmazásával***

Geotermikus mezők kialakítása esetében az egyik legbonyolultabb tárolómérnöki problémát a helyes visszasajtolási stratégia kialakítása jelenti. A legtöbb bonyolult geológiai adottságokkal rendelkező hévíztározó esetében, amelyek zömében repedezett magmás és metamorf kőzetekben helyezkednek el, gyakran előfordul, hogy a visszasajtoló fluidum váratlan útvonalakon keresztül igen hamar megjelenik a termelő

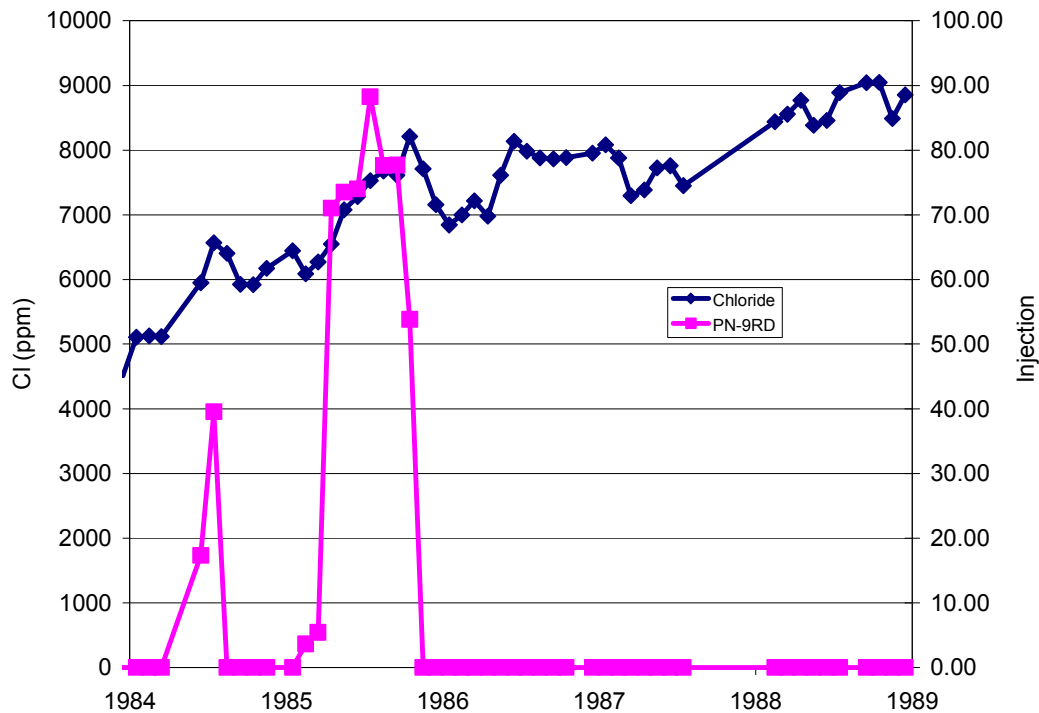
kutaknál. A lehűlt, visszasajtoló fluidum korai áttörése és megjelenése a termelő kutakban nagyon károsan hathat az adott geotermikus mező hatásfokára (Mádlné Szőnyi 2006). Sajnos ez a jelenségkör nagyon sokszor előfordul a geotermikus energia hasznosítás gyakorlatában (Horne, 1985).

A megfelelő visszasajtolási stratégia kialakításához alapvető fontosságú, hogy a vizsgált rezervoár térbeli vezetőképességi viszonyait minél jobban megismerjük (Alföldi és Lorberer 1976). Tradicionálisan ilyen esetekben a legtöbbször ún. nyomkövetési vizsgálatok lebonyolítására kerül sor (lásd pl. Fukuda, Akatsuka and Sarudate (2006)). Bár a nyomkövetési vizsgálatok általában hatékonyak, néhány hátrányos aspektussal is számolnia kell a szakembereknek, mint például:

1. Az eljárás igen költséges lehet.
2. A tényleges termelési viszonyok során más áramlási járatok játszhatnak nagyobb szerepet, mint a más nyomásviszonyok mellett végrehajtott nyomkövetési vizsgálatok során.
3. Több kutas mezők esetében az összes kút együttes vizsgálata csak nagyon nehezen valósítható meg a nyomkövetési vizsgálatok során.

Ezen okok miatt például egy nagyon elterjedt és népszerű módszer a fluidum tárolóbeli mozgásának a vizsgálatára a termelőkutakban mérhető klorid koncentráció értékek monitoring rendszerben történő vizsgálata, mint ahogy azt az előző esettanulmány is részletesen bemutatta. A gőz szeparációja miatt a visszasajtoló víz megnövekedett klorid koncentrációval jellemezhető. Harper and Jordan (1985) klasszikus cikke mutatta be ennek az eljárásnak az alkalmazásbeli lehetőségét a Palinpinon-I fülöp-szigeti geotermikus mező esetében.

1991-ben Urbino (Macario) and Horne a mért klorid koncentráció adatokat is felhasználó komplex regressziós vizsgálat végrehajtásával próbálta meghatározni a termelő és visszasajtoló kutak közötti hidraulikus kapcsolat erősségét. A 39. ábra az egyik termelő és besajtoló kútpár esetére ad egy vizuálisan is jól felismerhető példát.



**39. ábra**

A Palinpinon-I geotermikus mező esetében a klorid koncentráció [ppm] adatok az OK-7 termelő kútban és besajtolási hozam [kg/s] adatok a PN-9RD visszasajtoló kútban (Sullera and Horne 2001).

A 39. ábra jól azonosítható korrelációt mutat egy besajtoló kút hozama és a geotermikus mező egyik termelőkútjában mért klorid koncentráció között. Mint ahogy korábban is említettük, a vizsgált területen Sullera and Horne (2001) végzett komplex regressziós analízist a termelési adatok figyelembe vételével. Vizsgálataik eredményeként az alábbi modell feltételezéssel éltek, amelynek segítségével számíthatók a termelő kutak klorid koncentráció értékei.

$$Cl_p = a_0 + a_1 Q_{I1} + a_2 Q_{I2} + a_3 Q_{I3} + \dots + a_n Q_{In} , \quad (88)$$

ahol  $Cl_p$  = a klorid koncentráció a *P* jelű termelőkútban,  
 $Q_{In}$  = a besajtolási hozamok a visszasajtoló kutakban ( $I_n$ ),  
 $a_n$  = lineáris együtthatója az adott visszasajtoló kútnak ( $I_n$ ),  
 $a_0$  = a kezdeti klorid koncentráció értékét kifejező konstans.

A másik vizsgált modell kapcsolat a (88) egyenlet idő ( $t$ ) függéssel való kiegészítésével kapható meg.

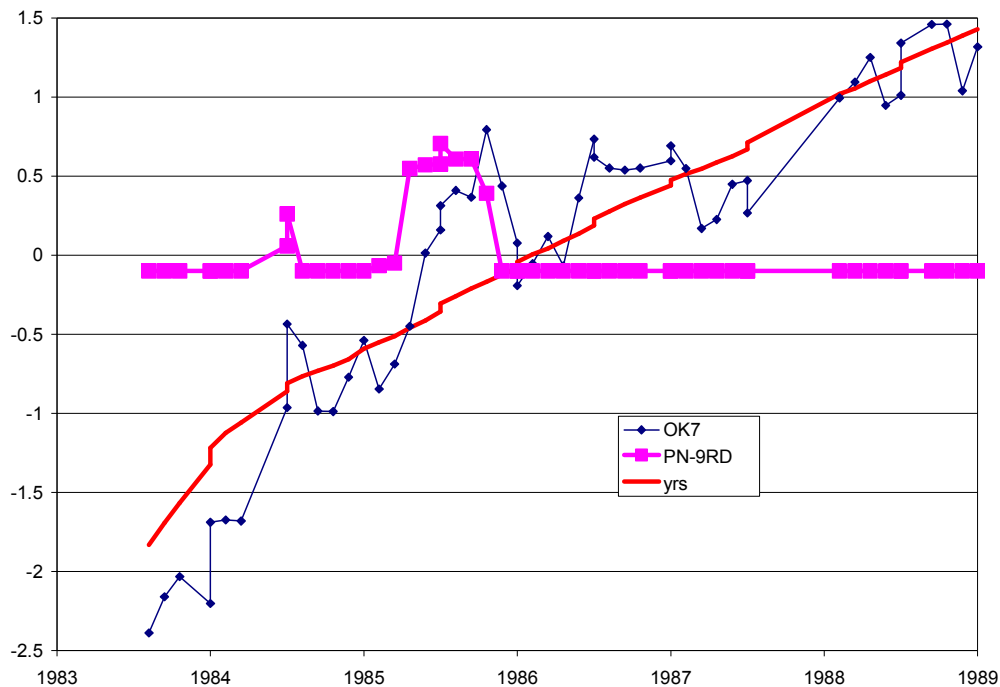
$$Cl_p = a_0 + a_1 Q_{I1} + a_2 Q_{I2} + a_3 Q_{I3} + \dots \dots + a_n Q_{In} + bt \quad (89)$$

Fentebb már bemutattuk a lineáris többváltozós regressziós vizsgálat főbb eredményeit. A vizsgálat során kapott „ $a$ ” koefficienseket tekinthetjük olyan speciális vezetőképességi indexeknek, amelyeknek a nagysága az adott termelő és visszasajtoló kútpár közötti hidraulikus kapcsolat erősségével arányos. Urbino (Macario) and Horne (1991) bebizonyították, hogy az alkalmazott regressziós egyenlet többé-kevésbé használható. Emellett a nyomkövetési vizsgálatok eredményei jó korrelációt adtak a származtatott vezetőképességi index értékekkel.

A 2. esettanulmány keretében a fentiekben már részletesen bemutattuk az ACE algoritmus alkalmazását és fontosabb eredményeit a vizsgált geotermikus mező termelési adatainak feldolgozása során. Az ACE algoritmus legfőbb előnye, hogy nem szükséges semmilyen matematikai kapcsolatot előre feltételezni a vizsgálatba bevont változók között. Az ACE nem-paraméteres regresszió saját maga tárja fel az analízis során a változók közötti legjobb kapcsolatot. Természetesen ebben az esetben is számíthatók ún. konnektivitás indexek, amelyek nagyon hasznos paraméterei lehetnek a helyes visszasajtolási stratégia megtervezésében.

Az ACE algoritmus által szolgáltatott néhány tipikus eredmény az OK-7 termelőkút esetében a 40. és 41. ábrákon, míg a PN-17D termelőkút esetében a 42. és 43. ábrákon láthatóak. Az ábrákra tekintve nagyon sok információt ki lehet olvasni. Ezekben az ábrákon már a vizsgált változók ACE transzformáltjait láthatjuk, amelyek sokkal inkább feltárják a függő és független változók közötti fennálló kapcsolat jellegét. Az ábrákból az is kiderül, hogy a  $t$  időváltozó esetében sem lineáris a kapcsolat, mint ahogy az a korábbi regressziós vizsgálatokban szerepelt. A 40. ábrán a PN-9RD besajtoló kút hatása különösen jól kivehető, mivel a kút hosszú időn keresztül üzemben kívül volt. PN-9RD besajtoló kút pozitív transzformált értékeinek nagysága arányos az OK-7 termelő kút felé fennálló hidraulikus vezetőképességgel. A 41. ábrán megjelennek az OK-7

termelő kút és az összes besajtoló kút ACE transzformáltjai, amelyek szintén arányosak a közettestben fennálló hidraulikus kapcsolat mértékével. A 42. és 43. ábrákon hasonló információkat találhatunk a PN-17D termelő kútra és az összes besajtoló kútra vonatkozóan.



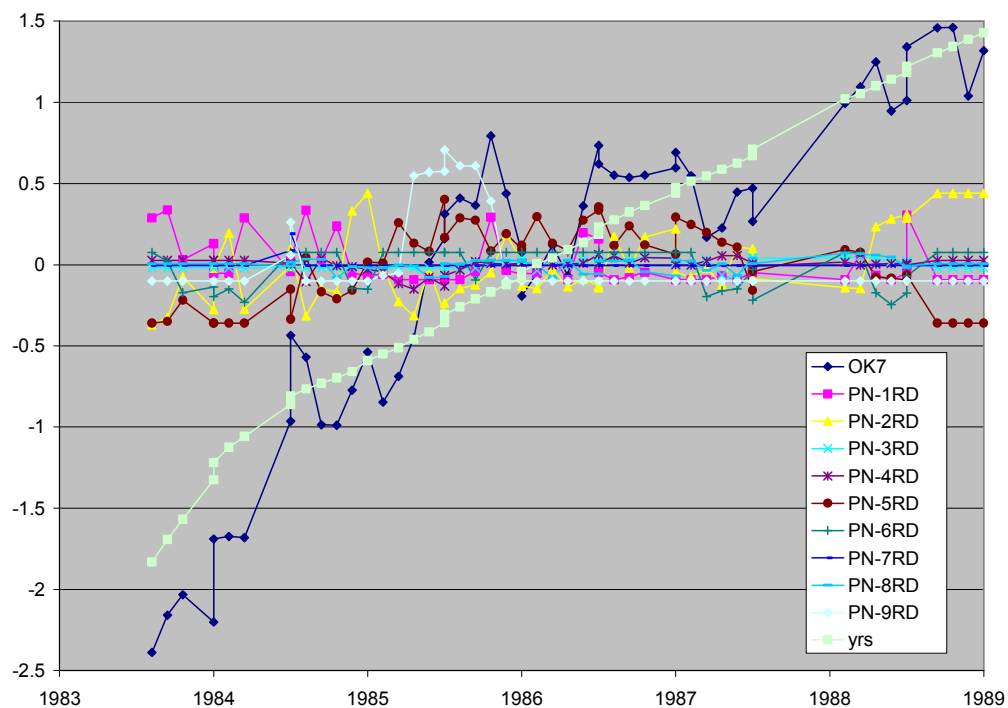
40. ábra

Az OK-7 termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja (vékony kék) valamint az idő (piros vonal) és a PN-9RD besajtoló kút hozamának (rózsaszín) ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.

A 41. és 43. ábrákon látható ACE transzformált adatok felhasználásának a segítségével képezhetünk egy ún. vezetőképességi indexet, amely a vizsgált termelő kút és  $q$  besajtoló kút közötti hidraulikus kapcsolat nagyságával arányos. Többfajta kifejezés kipróbálása után a vezetőképességi index számítására a következő kifejezést alkalmaztuk.

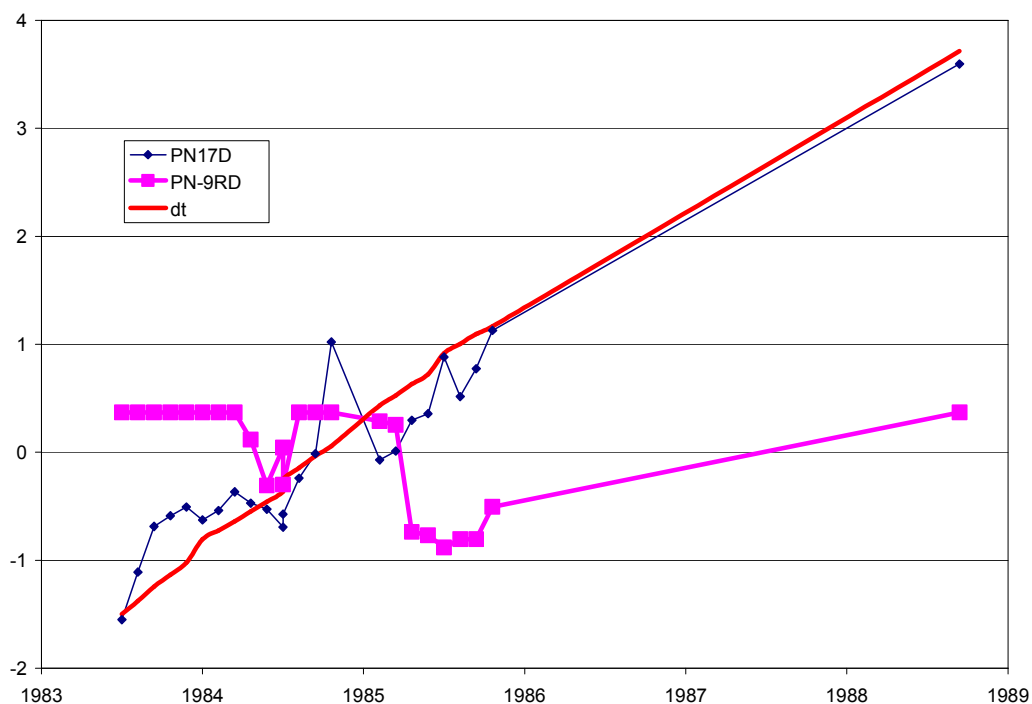
$$I_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |f_i(x_i(t_j))| \quad (90)$$

A számított index értékeket a 3. táblázatban foglaltuk össze, illetve grafikusan is megjelenítettük őket a 44. és 45. ábrákon.



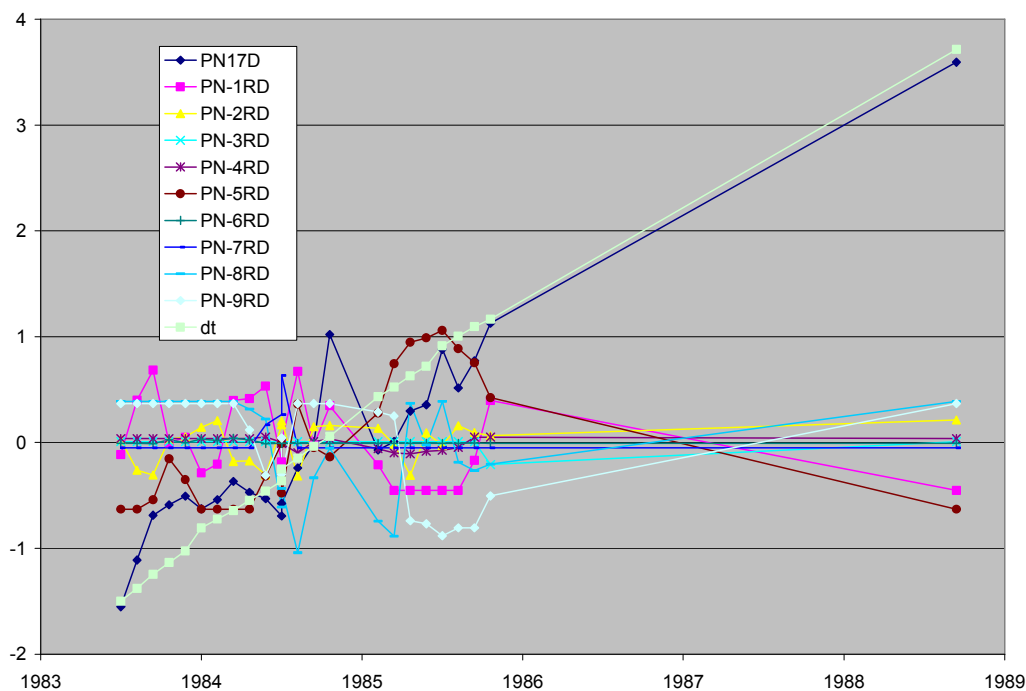
41. ábra

Az OK-7 termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja valamint az idő és az összes besajtoló kút hozamának ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.



42. ábra

A PN-17D termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja (vékony kék) valamint az idő (piros vonal) és a PN-9RD besajtoló kút hozamának (rózsaszín) ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.



43. ábra

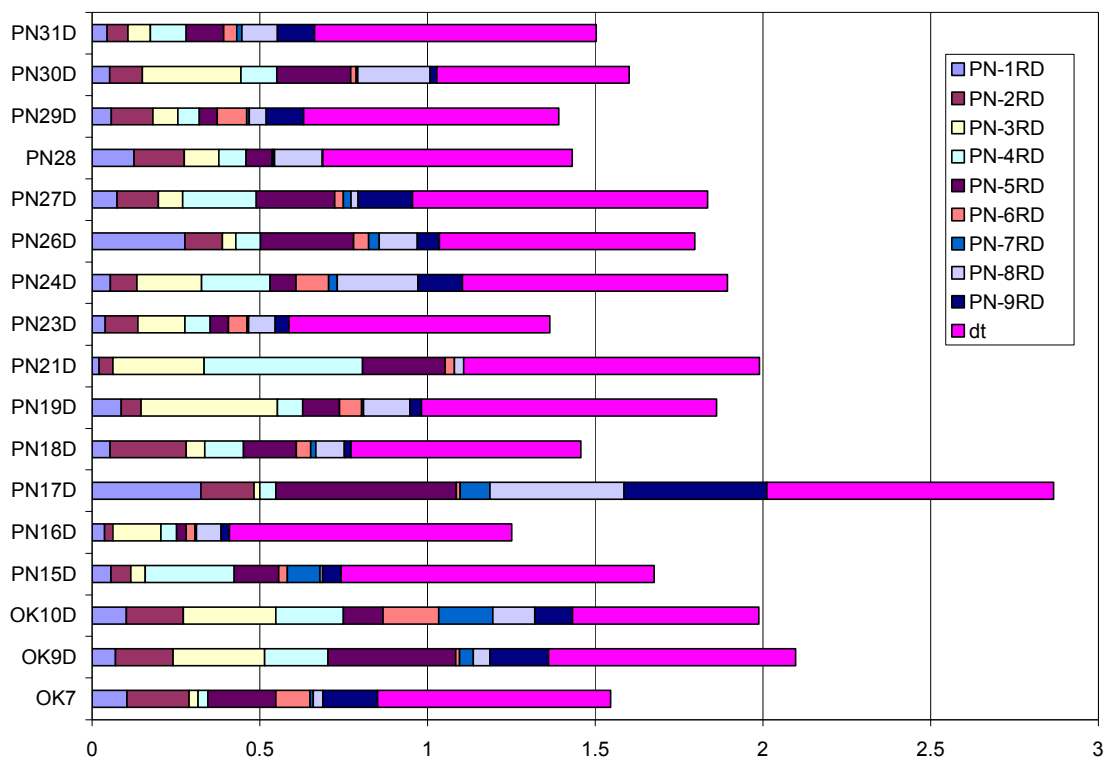
A PN-17D termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja valamint az idő és az összes besajtoló kút hozamának ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.

	<i>PN-1RD</i>	<i>PN-2RD</i>	<i>PN-3RD</i>	<i>PN-4RD</i>	<i>PN-5RD</i>	<i>PN-6RD</i>	<i>PN-7RD</i>	<i>PN-8RD</i>	<i>PN-9RD</i>	<i>dt</i>
<b>OK7</b>	0.10	0.19	0.03	0.03	0.20	0.10	0.01	0.03	0.16	0.69
<b>OK9D</b>	0.07	0.17	0.27	0.19	0.38	0.01	0.04	0.05	0.17	0.74
<b>OK10D</b>	0.10	0.17	0.28	0.20	0.12	0.17	0.16	0.13	0.11	0.56
<b>PN15D</b>	0.06	0.06	0.04	0.27	0.13	0.03	0.10	0.01	0.06	0.93
<b>PN16D</b>	0.04	0.02	0.14	0.05	0.03	0.03	0.01	0.07	0.03	0.84
<b>PN17D</b>	0.33	0.16	0.02	0.05	0.54	0.01	0.09	0.40	0.43	0.85
<b>PN18D</b>	0.05	0.23	0.06	0.12	0.16	0.04	0.02	0.09	0.02	0.69
<b>PN19D</b>	0.09	0.06	0.41	0.08	0.11	0.07	0.01	0.14	0.03	0.88
<b>PN21D</b>	0.02	0.04	0.27	0.47	0.25	0.03	0.00	0.03	0.00	0.88
<b>PN23D</b>	0.04	0.10	0.14	0.08	0.05	0.06	0.00	0.08	0.04	0.78
<b>PN24D</b>	0.06	0.08	0.19	0.20	0.08	0.10	0.03	0.24	0.13	0.79
<b>PN26D</b>	0.28	0.11	0.04	0.07	0.28	0.05	0.03	0.11	0.07	0.76
<b>PN27D</b>	0.08	0.12	0.07	0.22	0.23	0.03	0.02	0.02	0.16	0.88
<b>PN28</b>	0.13	0.15	0.10	0.08	0.08	0.00	0.00	0.14	0.00	0.74
<b>PN29D</b>	0.06	0.12	0.08	0.06	0.05	0.09	0.01	0.05	0.11	0.76
<b>PN30D</b>	0.05	0.10	0.29	0.11	0.22	0.02	0.01	0.22	0.02	0.57
<b>PN31D</b>	0.05	0.06	0.07	0.11	0.11	0.04	0.02	0.11	0.11	0.84

3. táblázat

Az ACE algoritmus alapján számított vezetőképességi indexek. Az egyes sorokban az egyes termelőkutak, míg az oszlopokban a besajtoló kutak és az idő szerepel.

A 44. ábra bemutatja az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékeket. Az egyes oszlopok hosszúsága a visszasajtolás hatását fejezi ki az adott termelőkútra. A jobb oldali rózsaszín szektorok a időfüggőség mértékét fejezik ki. A többi szegmens nagysága pedig az egyes visszasajtoló kutak és a termelőkút közötti hidraulikus kapcsolat erősségével arányos. A 45. ábra ugyanezeket az értékeket jeleníti meg egy más fajta módon. Ez a 2-dimenziós vizualizáció lehetővé teszi a legjobb vezetőképességű utak felismerését, és így feltárulnak azok a lehetséges útvonalak a tárolón belül, amelyek mentén a visszasajtoló, alacsony hőmérsékletű folyadék túlságosan hamar eljuthat a termelőkutakhoz.



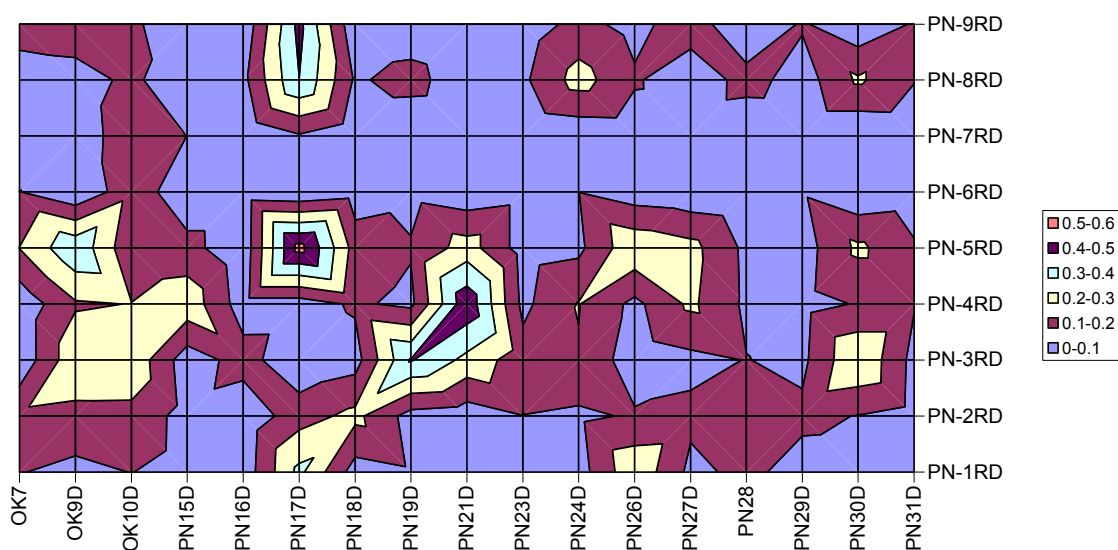
44. ábra

Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összefoglaló ábrája. Az egyes oszlopok hosszúsága a visszasajtolás hatását fejezi ki az adott termelőkútra. A jobb oldali rózsaszín szektorok az időfüggőség mértékét fejezik ki.

A bemutatott, ACE algoritmusra épülő eljárás segítségével számíthatunk ún. vezetőképességi index értékeket, de vajon ezeknek milyen a kapcsolata a vizsgált tározón belüli tényleges fluidum mozgás jellegével? Ezt akkor tudhatjuk meg, ha a kapott értéket összehasonlítjuk más eljárások alapján számítottakkal. Szerencsére a



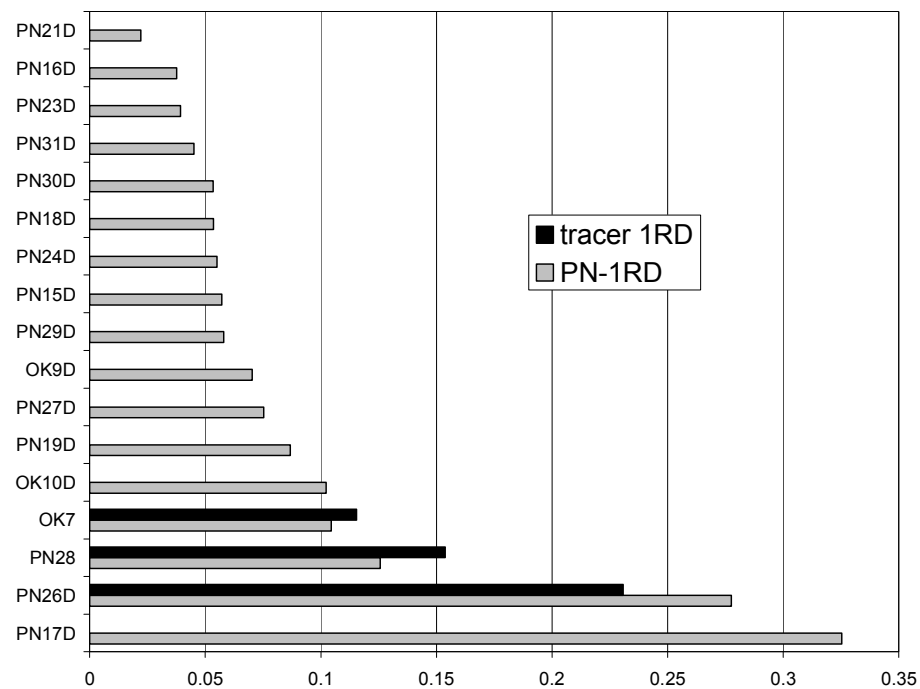
vizsgált esetben nyomkövetési eljárásokat is végeztek a Palinpinon-I mezőben. Ezeknek a nyomkövetési eljárásoknak a fontosabb eredményeit és következtetéseit Urbino, Zaide, Malate, and Bueza (1986) foglalta össze. Az értékelések eredményei bemutatják az egyes kútpárok esetében az ún. áttörési időt, azaz mennyi idő alatt jelent meg a besajtoló kútba betáplált nyomjelző anyag a termelőkútban. Másrészt arra is kapunk információt, hogy a nyomjelző anyag hányad része jutott át a termelőkúthoz. Ezekben az esetekben az áttörési idő reciproka lehet egy alkalmas indikátor a vizsgált kútpár közötti hidraulikus vezetőképesség jellemzésére, ha abból a feltételezésből indulunk ki, hogy a gyors áttörési idő jó vezetőképességet jelent.



**45. ábra**

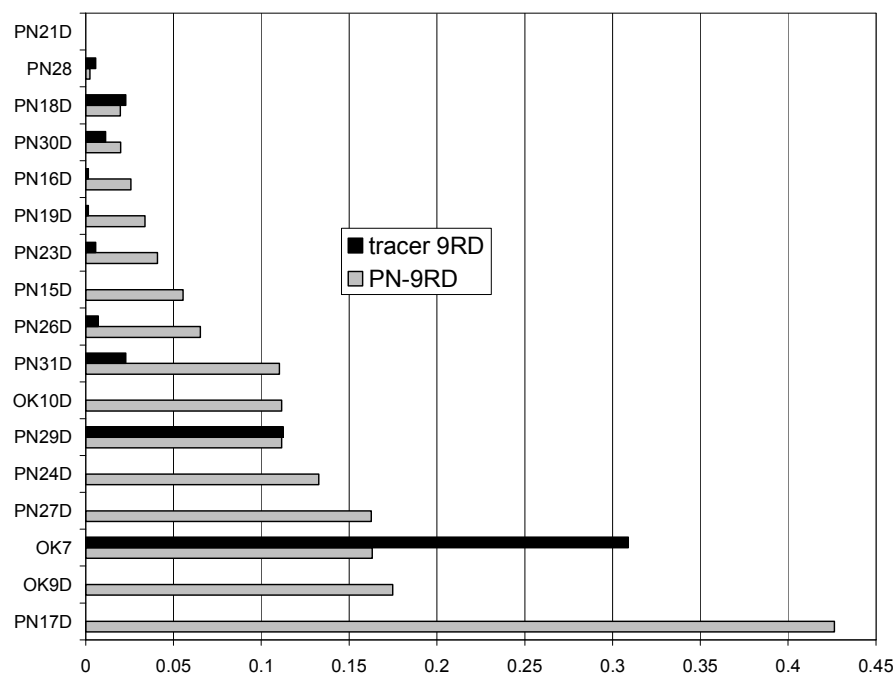
Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összefoglaló ábrája jelezve a kutak közötti vezetőképesség nagyságát.

A 46. ábra a PN-1RD besajtoló kút nyomkövetési vizsgálat eredményeit, illetve az ACE algoritmus alapján számított vezetőképességi indexeket hasonlítja össze. A különböző eljárások alapján származtatott eredmények jó egyezést mutatnak. A 47. ábra hasonlóan meggyőző eredményeket mutat be a PN-9RD besajtoló kútra.



46. ábra

Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összehasonlítása a nyomkövetési eljárások eredményei alapján számítottakkal a PN-1RD besajtoló kút esetében.



47. ábra

Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összehasonlítása a nyomkövetési eljárások eredményei alapján számítottakkal a PN-9RD besajtoló kút esetében.

#### **4. A tudományos eredmények összefoglalása és gyakorlati alkalmazása**

A hidrogeológiai és vízbányászati modellezés igen összetett és számtalan bizonytalansági tényezőt magában foglaló tevékenység. A felszín alatti kőzetekben lejátszódó hidrogeológiai folyamatokat csak a valóság jelentős egyszerűsítésével vagyunk képesek szimulálni. A modellezés folyamata során számtalan hiba lehetőség állhat elő, mint például a rosszul megfogalmazott koncepcionális modell, a mérési és egyéb hibák a terepi adatokban, nem megfelelő határ és kezdeti feltételek, túl sok modellparaméter, nem megfelelő térbeli és időbeli modell diszkretizáció, szimultán kalibrációja a vízhozamoknak és a szivárgási tényező értékeknek (ekvivalencia hatás), az érzékenységi vizsgálatok hiánya, nem megfelelő adat és modellértékelési eljárások, numerikus hibák, stb. (Szűcs, Tóth, Zákányi, Madarász 2006). Kutatómunkámban a modellezéssel kapcsolatos minden bizonytansági aspektust természetesen idő és egyéb tényezők hiányában nem vizsgálhattam. Elsősorban azokra a fejlesztési területekre koncentráltam, ahol szakmai és gyakorlati tudásom alapján új eljárásokat és eddig nem használt algoritmusokat dolgozhattam ki a felszín alatti vizekkel foglalkozó szakemberek számára.

Az értekezés keretében elvégzett elméleti és gyakorlati vizsgálatok alapján a következő megállapítások tehetők a hidrogeológiai és vízbányászati modellek megbízhatóságának növelésével kapcsolatban.

##### **1. Globális optimalizáció alkalmazása a hidrogeológiai és vízbányászati modellezési eljárások automatikus kalibrációs eljárásaiban (Szucs 1997; Szucs, Civan and Virag 2006).**

A hidrogeológiai és vízbányászati modellparaméterek pontosabb és megbízhatóbb meghatározása céljából saját fejlesztésű globális optimalizációs algoritmusokat kapcsoltam össze a MODFLOW, illetve az MT3DMS áramlási és transzport modulokkal a Groundwater Modeling System (GMS) programcsomag segítségével. Így sikerült megvalósítanom azt, hogy a gyakorlatban jól ismert PEST, UCODE és MODFLOW-2000 PES lokális minimumhely becslésen alapuló inverz kalibrációs algoritmusok mellett a „Simulating Annealing” (SA, illetve VFSA) eljárásra épülő konvergens, és a tényleges hibafüggvény minimumot produkáló eljárással is értékelhessük a különböző célú modelljeinket. A mai számítástechnika fejlettsége

mellett kb. 200 meghatározni kívánt modellparaméterig a javasolt Monte Carlo szimuláción alapuló eljárás nem jelent jelentős futtatási időtöbbletet. A javasolt eljárás hatékonyságát és megbízhatóságát mind lokális, mind regionális léptékű vízbázisvédelmi, vízkészlet-gazdálkodási és transzport modellek sorozatán keresztül bizonyítottam. Az automatikus kalibrációs eljárások ilyen irányú fejlesztése lehetővé teszi, hogy a szakemberek sokkal több időt és energiát fordíthassanak a modellezési eljárás koncepcionális kérdéseire. A javasolt eljárás további előnye, hogy nem kívánja meg a modell paraméterek kezdeti értékének a tényleges értékekhez közel eső becslését. A megbízhatóbb modellezési eredmények még inkább segítik a felszín alatti vizekkel kapcsolatos kérdések megoldását a szakmai döntéshozók munkájában.

## **2. A leggyakoribb érték (MFV) módszerének bevezetése és alkalmazása hidrogeológiai adatrendszerek feldolgozásában (Szucs and Civan 1997; Szűcs, Tóth és Virág 2006).**

A legkülönbözőbb típusú hidrogeológiai adatok feldolgozásában saját fejlesztésű programok és szubrutinok írásával bevezettem a leggyakoribb érték módszerét. Ennek az igen robusztus és rezisztens statisztikai eljárásnak az alkalmazásával jelentősen növelhető, illetve maximalizálható a hidrogeológiai mérési adatokból kinyerhető információ mennyisége. Ez különösen azokban a gyakorlati esetekben fontos, amikor egy adott vizsgált területről igen limitált a rendelkezésre álló adataink száma. A Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén működő geostatistikai team (amelynek magam is tagja voltam) által kidolgozott, a leggyakoribb érték módszerére épülő eljárásokat eddig elsősorban geofizikai jellegű problémák megoldásában használták. A leggyakoribb érték elvére épült, korábban mélyfúrási adatok kezelésére kidolgozott eljárásaimat módosítottam és továbbfejlesztettem, hogy figyelembe lehessen venni a hidrogeológiai adatrendszerek specialitásait. További előnyként említhető, hogy az automatikusan számított MFV súly értékek alapján a rendelkezésre álló különböző típusú adatok minőségellenőrzése igen könnyen elvégezhető.

## **3. A leggyakoribb érték (MFV) módszerén alapuló P-norma célfüggvényként való használata hidrogeológiai és vízbányászati modellek megbízhatóságának jellemzésére (Szűcs and Tóth 2005; Szűcs és Zákányi 2007).**

Bevezettem a hidrogeológiai és vízbányászati modellek megbízhatóságának jellemzésére a leggyakoribb érték módszerén alapuló P-norma használatát.

Bebizonyítottam, hogy a nagy statisztikai hatásfokkal rendelkező P-norma alkalmazása sokkal inkább javasolható a jelenleg elterjedt modellezési hibajellemzőként használt átlagos hiba (ME), az abszolút hiba (MAE) és az RMSE hiba definíciók mellett a vizsgált modell megbízhatóságának jellemzésére. Az automatikus súlyképzés eredményeként a modell kalibráció során felhasznált különböző mért adatok minőségellenőrzése is megtörténik. A súly értékek alapján könnyen eldönthető, hogy a különböző típusú adatok közül, elsősorban melyek játsszák a döntő szerepet az egyes modellparaméterek meghatározásában. Ez az információ a szokásos érzékenység vizsgálat mellett igen fontos szerepet játszik az aktuális modell általános értékelésében.

**4. Hidrogeológiai és vízbányászati modellek illesztési hibáinak széleskörű típus vizsgálatával vissza lehet szorítani a még napjainkban is erőteljesen uralkodó nézetet, miszerint a modellezési hibák Gauss-eloszlással közelíthetőek (Hajagos, Steiner and Szűcs 1999; Szűcs és Lénárt 2004).**

A modellezési gyakorlatban a klasszikus statisztika vezető szerepe még napjainkban is magyarázható annak a régi dogmának az elfogadásával, hogy “a hibák eloszlása mindig normális”. Hidrogeológiai modellezési hibák széleskörű típus-meghatározásával megmutattam, hogy milyen félrevezető lehet a szakemberek részére, ha olyan statisztikai próbákat használnak, mint például a  $\chi^2$ -próba. A Monte Carlo szimulációk és valós adatrendszerek segítségével bebizonyítottam, hogy a  $\chi^2$ -teszt nem ajánlható a gyakorlatban a hidrogeológiai és vízbányászati modellezési tevékenység során várható eloszlások normalitás vizsgálatára. Még ha a vizsgált minták eléggé különböznek is a Gauss eloszlástól, a  $\chi^2$ -teszt elfogadja azokat, mint normális eloszlásút a gyakorlatban leginkább alkalmazott magas szignifikancia szinteken. Ennek eredményeként, amikor  $\chi^2$ -tesztet alkalmazunk, a Gauss anyaeloszlás látszólag domináns jelenléte hozzájárulhat a hagyományos (nem robusztus és rezisztens) statisztikai algoritmusok túléléséhez.

**5. A gyakorló szakemberek körében leginkább elterjedt „trial-and-error” modell kalibráció eredményeinek javításában az MFV súlyokból képzett hisztogram használata (Szűcs és Virág 2005; Szucs 2007).**

Megmutattam, hogy a vízszint és az egyéb típusú hidrogeológiai adatok (pl. hozam) modellbeli eltéréseinek leggyakoribb érték szerinti súlyozása könnyen használható információt szolgáltat a modellezési eredmények javítására a hagyományos „trail- and-error” kalibrációs folyamat során. Így például a területhasználati korlátozást jelentő

vízbázisvédelmi célú védőterületek kijelölése, vagy a kitermelhető vízkészletek meghatározása nagyobb pontossággal és megbízhatósággal történhet. A „trial-and-error” kalibráció minden egyes lépésében, az egyszerűen előállítható MFV súlyok nagyon látványos és hasznos információt nyújtanak minden megfigyelőpontra az aktuális áramlási modell állapotról az illeszkedés jóságának vonatkozásában. A modellezés eredményeként előálló súlyok egyenkénti értékelése mellett, az MFV súlyok hisztogramja szintén hasznos információt ad a kalibráció állapotáról. Ily módon, az eltérésekből származtatott MFV súlyok könnyen gyorsíthatják a „trial-and-error” kalibráció folyamatát és minősítését a gyakorlati szakemberek számára.

#### **6. Terepi próbaszivattyúzási adatok minőségellenőrzött értékelése többlethiba hozzáadással, illetve globális optimalizáció és P-norma alkalmazásával (Szücs and Ritter 2002; Szucs, Madarasz and Toth 2007).**

A hidrogeológiai vizsgálatokban gyakran alkalmazott terepi próbaszivattyúzási adatok értékelésére újszerű eljárást dolgoztam ki. A szokásos megoldási módszerek helyett a globális optimalizáció és a P-norma alkalmazásával a vízföldtani paraméterek értékeit pontosabban tudjuk meghatározni. A javasolt inverziós számítás további előnye, hogy egyetlen mért terepi adathalmaz használatával a számított vízföldtani modellparaméterek bizonytalanságát vagy megbízhatóságát is meg lehet adni az MFV módszer és egy Monte Carlo szimuláció segítségével. Az eredeti mért adatrendszer inverziója során előállt reziduálok értéke alapján becsülni lehet a terepi adatok hibájának a skálaparaméterét. Ennek felhasználásával szuperponálhatunk többlet hibákat az eredeti mérési anyagunkra abból a célból, hogy az értékelési számítást többször elvégezve előállítsuk a hidrogeológiai modellparaméterek bizonytalansági jellemzőit. A javasolt algoritmus jól helyt áll stabilitás, konvergencia és robusztusság szempontjából.

#### **7. Az ACE nem-paraméteres regressziós eljárás adaptációja és széleskörű alkalmazása hidrogeológiai problémák megoldásában (Horne and Szucs 2007 a; Szucs 2007; Tóth, Bódi, Szucs and Civan 2002).**

Végrehajtottam a Stanford University intézményben Breiman és Friedman (1985) által kidolgozott ACE nem paraméteres algoritmus adaptációját hidrogeológiai többváltozós regressziós vizsgálatokhoz, ahol a vizsgált változók közötti kapcsolat a priori nem ismert. A javasolt nem-paraméteres, teljesen automatizált eljárás kiszámítja a vizsgált

változók optimális transzformáltjait többváltozós kiegyenlítési vizsgálatok során. Az algoritmus maximális korrelációt biztosít a vizsgált függő és a független változók transzformáltjai között. Az ACE algoritmus egyik nagy előnye, hogy a legkülönbözőbb típusú és nagyságú adatok együtt kezelhetők. Az ACE által szolgáltatott transzformáltak részletes vizsgálata új következtetésekre vezethet a vizsgált függő és független változók közötti kapcsolatok feltárásában (pl. ekvivalencia hatás, érzékenység vizsgálat, stb.). Természetesen az ACE algoritmusnak is megvannak a maga korlátai számtalan előnye mellett. Bizonyos esetekben az eljárás különböző eredményekre vezethet, ha megcseréljük a független változó sorrendjét. Másrészt az ACE algoritmus extrém kieső adatokra nagyon érzékenyen reagál. Természetesen itt is ki kell hangsúlyozni, hogy az ACE algoritmus csak akkor lehet tényleg hatékony, modern statisztikai eljárás, ha a vizsgált változók között létezik tényleges fizikai, vagy egyéb természettudományos kapcsolat, és a mérési adataink minőségellenőrzöttek. A bemutatott esettanulmányok (karszthidrogeológiai monitoring adatok vizsgálata, hévíztároló termelési adatok analízise) megmutatták, hogy az ACE algoritmus előnyösen alkalmazható a legkülönbözőbb típusú földtudományi problémák regressziós vizsgálatainál. Természetesen olyan esetekben, ahol a változók közötti kapcsolat laboratóriumi, terepi vagy egyéb vizsgálatok alapján jól definiált, a hagyományos sokváltozós lineáris vagy egyéb típusú kiegyenlítési eljárások is igen hatékonyan alkalmazhatók. Például a Miskolci Egyetem Alkalmazott Kémiai Kutatóintézetének munkatársaival egy olyan széles körben alkalmazható eljárást dolgoztunk ki, amelynek segítségével relatív permeabilitás görbéket lehet meghatározni laboratóriumi kiszorítási adatok segítségével (Tóth, Bódi, Szűcs, Civan 1998). A mért adatok felhasználásával a javasolt új, relatív permeabilitás viszonyok meghatározását végző eljárás alapösszefüggéseinek meghatározásánál igen széleskörű hagyományos, paraméteres regressziós vizsgálatot végeztem mind az  $L_2$ -norma, mind pedig a P-norma felhasználásával (Tóth, Bódi, Szűcs and Civan 1998; Tóth, Bódi, Szűcs and Civan 2000 a,b; Tóth, Bódi, Szűcs and Civan 2007 a,b).

**8. Másodlagos porozítású vízáadó kőzetekben kiképzett termelő és besajtoló kutak közötti hidraulikus vezetőképességi viszonyok meghatározása üzemi termelési adatok alapján az ACE nem-paraméteres regressziós eljárás segítségével (Szucs, Horne and Ritter 2007; Horne and Szucs 2007 b; Szűcs, Tóth and Horne 2007).**

Az ACE nem-paraméteres regressziós algoritmus igen hatékonyan alkalmazható másodlagos porozitású kőzetekben kiképzett kutak közötti vezetőképességi vizsgálatokra is. Egy fülöp-szigeteki geotermikus mező termelési adatainak és nyomkövetési vizsgálatainak felhasználásával bizonyítottam a javasolt módszer alkalmazhatóságát és megbízhatóságát. Az új eljárás a felhasználtakon kívül egyéb típusú termelési adatok (pl. nyomás, entalpia és különböző geokémiai alkotók, stb.) felhasználását is lehetővé teszi, hogy pontosabban megismerhessük a vizsgált felszín alatti rezervoár hidraulikai viszonyait és egyéb tulajdonságait (Lakatos 2007, Pápay 2003). A hidraulikai viszonyok pontosabb ismerete pedig elengedhetetlen a megfelelő és hatékony visszasajtolási stratégiai kialakításához a geotermikus mezők esetében. A bemutatott eredmények meggyőző módon bizonyítják, hogy az ACE algoritmussal számított vezetőképességi indexeknek tényleges fizikai tartalma van a fluidum áramlással kapcsolatban. A nyomkövetési eljárásokkal szemben a javasolt eljárásnak nagy előnye lehet, hogy rutinszerűen mért termelési adatokat használ fel, s nem szükséges megszakítani a normál üzemmenetet.



## **5. Köszönetnyilvánítás**

20 éves szakmai pályafutásom alatt a dolgozat első fejezetében részletesen ismertetett három eddigi munkahelyemen számos kollégával kerültem szakmai kapcsolatba. Sokan közülük nem csak szakmai tudásuk, hanem emberi vonásaik és jellemük révén is példaképül szolgáltak számomra. Köszönetemet fejezem ki Miskolci Egyetem Geofizikai Intézeti Tanszék, az Alkalmazott Kémiai Kutatóintézet (korábbi nevén MTA Bányászati Kémiai Kutatólaboratóriuma) és a Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék összes munkatársának, akik közül sokan egyetemista koromban tanáraim is voltak. Kiemelem Dr. Takács Ernő, Dr. Steiner Ferenc, Dr. Lakatos István, Dr. Tóth János, Dr. Szabó Imre és Dr. Juhász József professzor urak, eddigi munkahelyi főnökeim és szakmai vezetőim szerepét tudományos pályám alakulásában és fejlődésében. Hálás vagyok, és köszönettel tartozom Dr. Kovács Ferenc és Dr. Böhm József dékán uraknak, akiktől számtalan segítséget, biztatást és lehetőséget kaptam munkám és szakmai pályafutásom kibontakoztatásához.

Külföldi partnereim közül kiemelem Faruk Civan (University of Oklahoma) és Roland Horne (Stanford University) professzor urakat, akik segítségével bekerülhettem a nemzetközi szakmai körökbe közös munkánk, publikációink és konferencia előadásaink alapján. Köszönetemet fejezem ki Dr. Tóth József professzor emeritus-nak, akinek kanadai meghívása igen sokat lendített hidrogeológiai szakmai fejlődésemben. Köszönettel tartozom az ELTE Alkalmazott és Környezetföldtani Tanszékének, ahol meghívott előadóként lehetőséget kaptam kutatási eredményeim oktatásba való átültetésére és ismertetésére.

Köszönetemet fejezem ki számos hazai, felszín alatti vizekkel foglalkozó szakembernek, akikkel eddig munkám és kutatásaim alapján kapcsolatba kerültem. Nagyon sok segítséget kaptam Tőlük, hogy megismerjem a hazai és nemzetközi hidrogeológus társadalom képviselőit, illetve olyan munkákkal láttak el, amelyek révén kutatási eredményeimet a gyakorlatban is hasznosíthattam.

## 6. Felhasznált irodalom

1. Abramowitz M. and Stegun I., 1964: Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications, Inc., New York, pp. 228-231.
2. Alföldi L., Kapolyi L., 2007: Bányászati karsztvízszint-süllyesztés a Dunántúli-középhegységben. MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, Budapest, ISBN: 978-963-9545-15-1, pp. 1-138.
3. Alföldi L., Lorberer Á., 1976: A karsztos hévizek áramlásának vizsgálata kutatatok alapján. Hidrológiai Közöny, 56. évf., 10. szám, pp. 433-443.
4. Anderson M. P. and Woessner W.W., 1992: Applied Groundwater Modeling. Academic Press, San Diego, Calif., 381 p.
5. Breiman L. and Friedman J.H., 1985: Estimating optimal transformations for multiple regression and correlation (with discussion). Journal of American Statistical Association, 80, 580-619 (September).
6. Bobok E., 1987: Áramlástan bányamérnököknek. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, pp. 1-467.
7. Bobok E., 1993: Fluid Mechanics for Petroleum Engineers. Elsevier, Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo, pp. 1-400.
8. Caers J., 2005: Petroleum Geostatistics. Society of Petroleum Engineers. pp. 1-88.
9. Carrera J. and Neuman S.P., 1986a: Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 1. Maximum likelihood method incorporating prior information. Water Resources Research 22 (2), pp. 199- 210.
10. Carrera J. and Neuman S.P., 1986b: Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 2. Uniqueness, stability and pollution algorithms. Water Resources Research 22 (2), pp. 211- 227.
11. Carrera J. and Neuman S.P., 1986c: Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 3. Application to synthetic and field data. Water Resources Research 22 (2), pp. 228- 242.
12. Carrera J., Alcolea A., Medina, A., Hidalgo J., Sooten, L., 2005: Inverse problem in Hydrogeology. Hydrogeology Journal, 13, pp. 206-222
13. Chapra, S.C. and Raymond, P.C., 1988: Numerical methods for engineers. Second edition, McGraw-Hill Publishing Company, New-York, USA.
14. Chiang W.H. and Kinzelbach W., 2001: 3D Groundwater modeling with PMWIN. A simulation system for modeling groundwater flow and pollution. Springer- Verlag, 346 p.

15. Csepregi A., 2007: A karsztvíz termelés hatása a Dunántúli-középhegység vízháztartására. 3. fejezet a a Bányászati karsztvízstint-süllyesztés a Dunántúli-középhegységben c. könyvben. Szerkesztette: Alföldi László és Kapolyi László. MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, Budapest, pp. 77-113.
16. Dankó Gy., 2005: A Bábaapáti tervezett nukleáris hulladéktároló biztonsági értékelésének geoszféramodellje. Magyarhoni Földtani Társulat, Geomatematikai Szakosztály, "Roadshow", Miskolc-Egyetemváros, 2005. február 18.
17. Dóbróka M., 2001: Bevezetés a geofizikai inverzióba. Miskolci Egyetemi kiadó, pp. 1-209.
18. Dóbróka, M., Gyulai, Á., Ormos, T., Csokás, J. and Dresen, L., 1991, Joint inversion of seismic and geoelectric data recorded in an underground coal mine. *Geophysical Prospecting* 39: pp. 643- 665.
19. Doherty J., 2000: PEST, Model Independent Parameter Estimation, fourth edition, program documentation, Watermark Numerical Computing, p. 249.
20. Dutter, R., 1987: Mathematische Methoden in der Montangeologie. Vorlesungsnotizen. Manuscript, Leoben.
21. Environmental Modeling Research Laboratory (EMRL) of Brigham Young University (2002): Groundwater Modeling System (GMS 4.0), Tutorial Manual.
22. Erdélyi M., 1979: A magyar medenve hidrodinamikája. *Hydrodynamics of the Hungarian Basin*. VITUKI Közlemények 18, Budapest, 1-82.
23. Ferenczy L., Kormos L. and Szucs P., 1990. A new statistical method in well log interpretation, Paper O, in 13th European Formation Evaluation Symposium Transactions: Soc. Prof. Well Log Analysts, Budapest Chapter, pp. 1-17.
24. Filep Gy., Kovács B., Lakatos J., Madarász T., Szabó I. 2002: Szennyezett területek kármentesítése. Szerkesztette: Szabó Imre, Miskolci Egyetemi Kiadó, pp. 1-483.
25. Friedman J.H. and Stuetzle W., 1982: Smoothing of Scatterplots. Technical report ORION006, Dept. of Statistics, Stanford University, California, July.
26. Fukuda, D., Akatsuka, T., and Sarudate, M., 2006: Characterization of Inter-Well Connectivity Using Alcohol Tracer and Steam Geochemistry in the Matsukawa Vapor-Dominated Geothermal Field, Northeast Japan. *Geothermal Resources Council, Transactions*, Vol. 30, pp. 797-801.
27. Galántai A., 2007: Optimalizálási módszerek. Miskolci Egyetemi Kiadó, pp. 1-87.

28. Gáspár E., Viszkok J., 2004: A fenyőfői bauxitbánya hidrodinamikai modellezése végeelem módszerrel. Felszín Alatti Vizekért Alapítvány, XI. Konferencia, Balatonfüred.
29. Gondárné Sőregi K., Gondár K., Kun É., Székvölgyi K., 2005: Karsztos hévíztároló modellezése a DNY-Bükkben. Felszín Alatti Vizekért Alapítvány, XII. Konferencia, Balatonfüred.
30. Hajagos, B. and Steiner, F., 1991. Different measures of the uncertainty. *Acta Geod. Geoph. Mont. Hung.*, 26: 183- 189.
31. Hajagos, B. and Steiner, F., 1995. Symmetrical stable probability distributions nearest lying to the types of the supermodel  $f_a(x)$ . *Acta Geod. Geoph. Hung.*, Vol. 30., (2- 4), pp. 463- 470.
32. Halász B., 1995: Felszín alatti vizekkel való gazdálkodás rétegzett rendszerekben. BME, doktori disszertáció, pp. 1-134.
33. Halász B., Szőke S., 1992: Nem-lineáris vízgazdálkodási modell rétegzett hidrogeológiai rendszerekben. *Hidrológiai Közlöny*, 72. évf., 5-6. szám, pp. 332- 337.
34. Harbaugh A.W., Banta E.R., Hill M.C., and McDonald M.G., 2000: MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey Modular Ground Water Model– User guide to modularization concepts and the groundwater flow process. U.S. Geological Survey, Open File Report 00- 92.
35. Hardle W., 1990: Nonparametric Regression. Cambridge University, Cambridge, England.
36. Harper, R T. and Jordan, O.T., 1985: Geochemical Changes in Response to Production and Reinjection for Palinpinon-I Geothermal Field, Negros Oriental, Philippines. *Proceedings*, New Zealand Geothermal Workshop, 1985, pp. 39-44.
37. Hill M.C., 1992: A computer program (MODFLOWP) for estimating parameters of a transient, three dimensional ground water flow model using nonlinear regression. U.S. Geological Survey, Open File Report 91- 484.
38. Hill M.C., 1998: Methods and Guidelines for Effective Model Calibration. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98- 4005.
39. Hill M.C., Banta E.R., Harbaugh A.W., and Anderman E.R., 2000: MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey Modular Ground Water Model– User Guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter Estimation Processes and Three Post Processing Programs. U.S. Geological Survey, Open File Report 00- 184.

40. Horne, R.N., 1985: Reservoir Engineering Aspects of Reinjection, *Geothermics*, 14(2/3), (1985), pp. 449-458.
41. Huber, P.J., 1981. Robust statistics. Wiley, New York, NY, 308 pp.
42. Ingber, L., 1989: Very fast simulated reannealing. *Mathl. Comput. Modeling*, 12, 8, pp. 967- 993.
43. Isaaks E.H., Srivastava R.M., 1989: Applied Geostatistics. Oxford University Press, pp.1-561.
44. Jeczkó J., Halász B., 1986: Talajvíz térképek készítése matematikai modellezéssel. *Vízügyi Közlemények*, 2. füzet, pp. 248-259.
45. Juhász J., 2002: Hidrogeológia. Akadémiai Kiadó, Budapest, pp. 1-1176.
46. Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Jr., and Vecchi, M.P., 1983: Optimization by simulated annealing. *Science*, 220, 671- 680.
47. Kitanidis P.K., 1997: Introduction to geostatistics: Applications to hydrogeology. Cambridge University Press, p. 249.
48. Kovács, B., 2004: Hidrodinamikai és transzport modellezés I. (Processing MODFLOW környezetben.) Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Szegedi Tudomány Egyetem, Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszék, GÁMA-GEO Kft., pp. 1-159.
49. Kovács, B., Szanyi J., 2005: Hidrodinamikai és transzport modellezés II. (Processing MODFLOW és Surfer for Windows környezetben.) Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Szegedi Tudomány Egyetem, Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszék, GÁMA-GEO Kft., pp. 1-213.
50. Kovács J., Székely I., 1998: Analysis of short time series. An application to chemical composition data of thermal water resources of Budapest. VII. International Congress of Ecology. Firenze, Abstract: pp. 236.
51. Lakatos I. (Ed.), 2007: Smart Fields, Smart Wells and Smart Technologies. Budapest, Akadémiai Kiadó, 315. p., Progress in Oil Field Chemistry, Vol. 7.
52. Lee, T- C., 1999: Applied Mathematics in Hydrogeology. Lewis Publishers and CRC Press LLC, ISBN 1- 56670- 375- 1.
53. Lénárt, L. (2006): A Bükk-térség karsztvízpotenciálja – a hosszú távú hasznosíthatóságának környezetvédelmi feladatai. Észak-magyarországi Stratégiai Füzetek. III. évf. 2. sz. pp. 17-28. Miskolc.
54. Liebe, P., 2007: Felszín alatti vizeink, ásványvizeink, hévizeink. A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat, 72. kötet, Miskolci Egyetemi

- Kiadó, "IV. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről. Dr. Juhász József 80. születésnapjára. pp. 25-35.
55. Lines, T.R. and Treitel, S., 1984. Tutorial: A review of least squares inversion and its application to geophysical problems. *Geophysical Prospecting*, 32: 159- 186.
56. Marsily de Gh., Delhomme J.P., Coundrain Ribstein A. and Lavenue A.M., 2000: Four Decades of Inverse Problems in Hydrogeology. Paru dans *Geophysical Society of America*, Special paper 348, pp. 1- 28.
57. Marquardt, D.W., 1970: Generalized inverses, Ridge regression, biased linear estimation, and nonlinear estimation. *Techometrics* 12: pp. 591- 612.
58. Marton L., Szanyi J., 2000: A talajvíztükör helyzete és a rétegvíztermelés kapcsolata Debrecen térségében. *Hidrológiai Közöny*, 80. évf., 1. szám, pp. 2-18.
59. Mádlné Szőnyi J., 2006: A geotermikus energia. Grafon. ISBN 963 218 058 5, pp. 1-144.
60. Menke, W., 1984: *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory*, Academic Press.
61. Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M, Teller, A., and Teller, E., 1953: Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21, 1087- 1092.
62. Mező Gy., 2005: Felszín alatti áramlási- és transzport folyamatok véges elemes modellezése. Magyarhoni Földtani Társulat, Geomatikai Szakosztály, "Roadshow", Miskolc-Egyetemváros, 2005. február 18.
63. Mosteller F. and Tukey J.W., 1977: *Data Analysis and Regression*. Addison-Wesley.
64. Pápay J., 2003: *Development of Petroleum Reservoirs*. Akadémiai Kiadó, Budapest.
65. Pintér J., Szabó J., 1986: Globális optimalizálási eljárások és vízgazdálkodási alkalmazásaik. *Vízügyi Közlemények*, 68. évf., 4. sz., pp. 520-529.
66. Poeter E.P., Hill M.C., 1998: Documentation of UCODE. A Computer Code for Universal Inverse Modeling. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98- 4080.
67. Sen, M., Stoffa, P.L., 1995: *Global Optimization Methods in Geophysical Inversion*. *Advances in Exploration Geophysics* 4. Elsevier, pp. 1-281.
68. Simonffy Z., 1998: Szennyeződés-terjedési modellek alkalmazása. Kármentesítési Kézikönyv, 1, Budapest, pp. 1-146.

69. Somlyódy L., 2002: A hazai vízgazdálkodás stratégiai kérdései. Magyar Tudományos Akadémia, Budapest, pp. 1-402.
70. Steiner, F., 1965. Interpretation of Bouguer maps (in Hungarian). Dissertation. Manuscript. Miskolc, 80- 94.
71. Steiner, F., 1972. Simultane interpretation geophysikalischer messdatensysteme. Review Pure and Applied Geophysics, 96: 15- 27.
72. Steiner, F., 1988. The most frequent value procedures. Geophysical Transaction 34: No. 2- 3, 226p.
73. Steiner, F., 1990. The Bases of Geostatistics (in Hungarian). Tankönyvkiado, Budapest, Hungary, 363pp.
74. Steiner, F., (Editor), 1991. The Most Frequent Value. Introduction to a Modern Conception Statistics. Akademia Kiado, Budapest, Hungary, 314pp.
75. Steiner, F. and Hajagos, B., 1994. Practical definition of robustness. Geophys. Trans., 38: 193- 210.
76. Steiner, F. and Hajagos, B. 1995. Determination of the parameter errors (demonstrated on a gravimetric example) if the geophysical inversion is carried out as the global minimization of arbitrary norms (demonstrated by the  $P_c$  norm). Magyar Geofizika, Vol. 36: 261- 276.
77. Steiner, F., (ed.) 1997: Optimum methods in statistics. Akademia Kiado, Budapest. 370 pp.
78. Sullera Ma. M., Horne R. N., 2001: Inferring injection returns from chloride monitoring data. Geothermics 30, 591-616.
79. Szabó I., 1999: Hulladékelhelyezés. Miskolci Egyetemi Kiadó. pp. 1-440.
80. Székely F., 1999: Numerical modeling of drainage schemes in layered formations: a Kuwait City case study. Groundwater 37, pp. 879-883.
81. Székely F., 2006a: A háromdimenziós kúthidraulikai modellezési módszer és gyakorlati alkalmazása. VITUKI 79, Budapest, pp. 1- 113.
82. Székely F., 2006b: Vízkutak és heterogén földtani környezet kölcsönhatásának modellezése. MTA Doktori rövid értekezés, Budapest.
83. Szócs T., 2005: Áramlási rendszerek, víz-kőzet kölcsönhatások megismerése és alkalmazása. Esettanulmány: Tolnai hegyhát (Diósberény-Udvari), Doktori értekezés, ELTE és MÁFI, Budapest, pp. 1-135.
84. Tóth Gy., Rotárné Szalkai Á., Horváth I., 2003: A Kárpát-medence magyarországi részének hidrológiai modellezése. A Magyar Állami Földtani Intézet hozzájárulása

- a feladat megoldásához. Felszín alatti vizeink kutatása, feltárása, hasznosítása és védelme I., Szemelvények a kutatás és az oktatás munkáiból. X. FAVA Konferencia, Balatonfüred. pp. 1-15.
85. Tóth J., 1999: Groundwater as a geologic agent: An overview of the causes, processes, and manifestations. *Hydrogeology Journal* (7), pp. 1-14.
86. Tóth J, Angelus B, Bakacsi Zs, Molnár Zs, Szanyi J, Szőnyi J, Szűcs P, Varsányi I. (2000) Pannonian Basin Hydrogeological Research Program (PBHRP) Proposal {#3} and List of Suggested Component Projects. University of Alberta, Edmonton, 2000 December 1, 34 p.
87. Urbino, M.E.G., Zaide, M. C., Malate, R.C.M. and Bueza, E.L., 1986: Structural Flowpaths of Reinjecting Fluids Based on Tracer Tests - Palinpinon I, Philippines, *Proceedings*, New Zealand Geothermal Workshop 1986, pp. 53-58.
88. Urbino, M.E.G., and R.N. Horne, 1991: Optimizing ReInjection Strategy at Palinpinon, Philippines, Based on Chloride Data. *Proceedings*, 16th Stanford Geothermal Workshop, Jan. 1991, Stanford, CA.
89. Vágás, I., 1968: A kúthidraulika geometriai szemlélete. *Hidrológiai Közlöny*, 4. szám, pp. 189-196.
90. Vágás I., 1974: A Bolyai geometria a műszaki tudományban. *Hidrológiai Közlöny*, 9. szám, pp. 396-402.
91. Völgyesi, I., 1993: Mederkapcsolati hatások: partiszűrő víztermelés fontos paramétere. *Hidrogeológiai Közlöny*, 73. évf., 5. sz.
92. Völgyesi, I., 2005: Mennyit termelhetünk a felszín alatti vízkészletekből. *Hidrológiai Közlöny*, 85. évf., 5. szám, pp. 20-25.
93. Wang D. and Murphy M., 2004: Estimating Optimal Transformations for Multiple Regression Using the ACE Algorithm. *Journal of Data Science* 2(2004), 329-346.
94. Xue G., Datta-Gupta A., Valko P. and Blasingame T., 1997: Optimal transformations for multiple regression: application to permeability estimation from well logs. *SPE Formation Evaluation*, 85-93 (June).
95. Zámbo J., 1966: Telepítéselmélet a bányászatban. Műszaki Könyvkiadó, pp. 1-155.



## **7. Az értekezésbe hivatkozott, a Ph.D. fokozat megszerzése (1996) után megjelent publikációk**

### **1997.**

- **P. Szűcs**, F. Civan

Multi-layer well log interpretation using the simulated annealing method.

Journal of Petroleum Science and Engineering, 14, 1997., pp.209-220.

Impact factor: 0.547

- **Szűcs P.**, Robonyi A.

Szénhidrogén-tárolókban létrejövő formációkárosodás matematikai modellezése.

Magyar Geofizika, 38. évfolyam, 1. szám, pp. 30-36., 1997.

- **P. Szűcs**

Optimum methods in Statistics. Edited by F.Steiner. Chapter 10.3 (pp. 257-275), Chapter App. III. (pp. 294-298), Chapter App. V. (pp. 303-311). Published by Akadémia Kiadó, Budapest, Hungary in 1997. ISBN 963 05 7439 X.

### **1998.**

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs**, F. Civan

Practical method for analysis of immiscible displacement in laboratory core tests.

Transport in Porous Media, 31., pp. 347-363., 1998., Kluwer Academic Publisher.

Impact factor: 1.101

- **P. Szűcs**, J. Tóth and A. Robonyi

The role of core analysis in formation damage evaluation.

Sixth Symposium on Mining Chemistry, Siófok, Hungary, 27-30 September 1998.

Proceedings, pp. 125-130.

- Robonyi A., **Szűcs P.**

Megjegyzések a perforálások réteggkárosító mechanizmusához.

Kőolaj és Földgáz, 31. (131) évfolyam, 12. szám, pp. 205-209., 1998.

- **Szűcs P.**, Robonyi A.

A geofizika és a mélyfúrási technológia szerepe a formációvédelemben.

Magyar Geofizika, 39. évf. OTKA különszám, pp. 50-52., 1998.

-Steiner F., Hajagos B., Hursán L., **Szűcs P.**

Modern statisztikai módszerek alkalmazása a mélyfúrási geofizikai szelvény-értelmezésben.

Magyar Geofizika, 39. évf. OTKA különszám, pp. 26-27., 1998.

**1999.**

- B. Hajagos, F. Steiner, **P. Szűcs**

Two tests of 'normality'.

Acta Geod. Geoph. Hung., Vol. 34 (1-2), pp. 71-78, 1999.

- **P. Szűcs**, J. Tóth, Gy. Palásthy (a)

Monitoring program to detect subsidence and compaction of hydrocarbon reservoirs.

Second International Conference on Environmental Engineering

University of Veszprém, Hungary, Proceedings, pp. 193-197., 1999.

- **P. Szűcs**, J. Tóth, A. Robonyi

Role of core analysis in formation damage evaluation.

Progress in Mining and Oilfield Chemistry, Vol. 1., pp. 135-140., 1999.

Akadémiai Kiadó, Budapest

- **P. Szűcs**, J. Tóth, Gy. Palásthy (b)

Environmental monitoring program based on well logging and geodesy to detect subsidence and compaction.

5<sup>th</sup> meeting of the Environmental and Engineering Geophysical Society European Section, Proceedings, Poster paper WIP3, Budapest, Hungary, September 6-9, 1999.

**2000.**

- Petró I., **Szűcs P.** (a)

Behaviour of hydraulic conductivity around water wells.

microCAD 2000, Nemzetközi Számítástechnikai Tudományos Konferencia,

2000. február 23-24., Miskolc-Egyetemváros, A: Geoinformatika, környezetvédelem szekció, pp. 81-84.

- **P. Szűcs**, J. Tóth, Gy. Palásthy, A. Robonyi, I. Petró

Subsidence monitoring program to control environmental contamination processes.

CERECO 2000, The 3<sup>rd</sup> International Conference on the Carpathian Euroregion Ecology, Miskolc-Lillafüred, Hungary, May 21-24, 2000., pp 91-95.

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs**, F. Civan (a)

Linear equations derived from laboratory experiments to describe immiscible displacement.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutions, Perspectives

UFA State Petroleum Technological University, University of Miskolc, Proceedings, ISBN 5-7831-0311-X, pp. 259-276., 2000.

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs**

Calculation of relative permeability from displacement test data.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutions, Perspectives

UFA State Petroleum Technological University, University of Miskolc, Proceedings, ISBN 5-7831-0311-X, pp. 277-285., 2000.

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs** and F. Civan (b)

Analytical Techniques for Determination of Relative Permeability from Displacement Experiments.

Progress in Mining and Oilfield Chemistry, Vol. 2., pp. 91-100, 2000.

Akadémiai Kiadó, Budapest

István Lakatos (ed.): Novelties in Enhanced Oil and Gas Recovery

- I. Petró, **P. Szűcs** (b)

Change of the value of the hydraulic conductivity in the surroundings of water wells.

"Universitaria Ropet 2000", International Scientific Symposium, October 19-20, 2000, Petrosani, Roumania, Proceedings, pp. 15-16.

## **2001.**

- **Szűcs P.**, Tóth J. (a)

A gravitációs és a túnyomásos folyadékáramtér viselkedése az illancsi területen.

microCAD 2001, Nemzetközi Tudományos Konferencia,

2001. március 1-2., Miskolc-Egyetemváros, B: Geoinformatika, környezetvédelem szekció, pp. 107-112.

- **Szűcs P.**, Tóth J. (b)

A hidraulikus rétegrepsztes formációkárosodási hatása.

microCAD 2001, Nemzetközi Tudományos Konferencia,

2001. március 1-2., Miskolc-Egyetemváros, B: Geoinformatika, környezetvédelem szekció, pp. 101-106.

- Petró I., **Szűcs P.**

Phenomena of suffosion processes around water wells.

microCAD 2001, Nemzetközi Tudományos Konferencia,

2001. március 1-2., Miskolc-Egyetemváros, B: Geoinformatika, környezetvédelem szekció, pp. 153-158.

- **Szűcs P.**, Tóth J. (c)

A gravitációs és a túnyomásos folyadékáramtér hidrodinamikai vizsgálata az illancsi területen.

"VIII. Konferencia a felszín alatti vizekről", 2001. március 6-7., Balatonlelle, Felszín Alatti Vizekért Alapítvány.

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs**, F. Civan

Direct determination of relative permeability from nonsteady-state constant pressure and rate displacements.

SPE 67318 paper at the SPE Production and Operations Symposium held in Oklahoma City, Oklahoma, 24-27 March, 2001.,

SPE Journal, Vol 7, (1), pp. 1-10., 2002.

Impact factor: 0.588

## **2002.**

- **P. Szűcs**

Inversion of pumping test data for improved interpretation.

microCAD 2002, Nemzetközi Tudományos Konferencia, 2002. március 7-8.

Miskolc-Egyetemváros, A: Geoinformatika, Térinformatika szekció, pp. 107-112.

- **P. Szűcs** and J. Tóth

Formation Damage Induced by Fracturing.

Progress in Mining and Oilfield Chemistry, Vol. 3., pp. 197-202, 2002.

Akadémiai Kiadó, Budapest,

István Lakatos (ed.): Recent Advances in Enhanced Oil and Gas Recovery

- **P. Szűcs**

Global Optimization in Earth Science Applications.

Fulbright – Challenges and Responses, Conference Celebrating the 10<sup>th</sup> Anniversary of the Hungarian-American Fulbright Commission and the Hungarian Fulbright Association, April 24-25, 2002, Budapest, Hungary, pp. 29-30.

- **P. Szűcs** and Gy. Ritter

Improved interpretation of pumping test results using simulated annealing optimization.

ModelCARE 2002, Proceedings of the 4th International Conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modeling. Prague, Czech Republic, 17-20 June 2002.

ACTA UNIVERSITATIS CAROLINAE – GEOLOGICA 2002, 46 (2/3), pp. 238-241.

- Tóth J., **Szűcs P.**

A hidraulikus rétegrepesztés által okozott formációkárosodási jelenségek.

XXV. Nemzetközi Olajipari Konferencia, Kőolaj és Földgáz Termelés-Művelés Szekció, Balatonfüred, 2002. október 10-12., pp. 1-14.

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs**, F. Civan

Convenient formulae for determination of relative permeability from unsteady-state fluid displacements in core plugs.

Journal of Petroleum Science and Engineering, 36 (2002), pp. 33-44., ELSEVIER

Impact factor: 0.547

### **2003.**

- J. Tóth, **P. Szűcs**, T. Bódi, F. Civan

Determination of relative permeability for heterogeneous cores from laboratory displacement experiments.

Progress in Mining and Oilfield Chemistry, Vol. 4., pp. 191-202, 2002., Akadémiai Kiadó, Budapest, István Lakatos (ed.): Focus on Remaining Oil and Gas Reserves

- Zs. Nyári, **P. Szűcs**, P. Tildy

Hydrogeological modelling using geophysical data in groundwater protection projects.

EGS (European Geophysical Society) – AGU (American Geophysical Union) – EUG (European Union of Geosciences) Joint Assembly, Nice, France, 06-11 April, 2003.

Geophysical Research Abstracts, Vol. 5, 05640, 2003.

- I. Szabó, A. Szabó, **P. Szűcs**, L. Lénárt, A. Dassargues, R. Drobot:

SQUASH project, quantitative and qualitative hydrogeological study of the alluvial aquifer of Somes-Szamos (romania-Hungary).

XIIIth European Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering, 25-28 August 2003, Prague, Czech Republic.

Main Session 6 „European Geotechnical Networking”, Proc. XIII ECSMGE, Vanicek et al. (eds.), CGtS Prague, ISBN 80-86769-02-X, Vol. 3, 2003.

- J. Tóth, T. Bódi, **P. Szűcs** and F. Civan:

Determination of relative permeability for homogeneous and heterogeneous cores from unsteady-state displacements. 12th European Symposium on Improved Oil Recovery, EAGE, European Association of Geoscientists and Engineers, Kazan, Russia, 8-10 September 2003, A022, pp. 638-645.

- L. Lénárt, T. Madarász, L. Mikó, A. Szabó, **P. Szűcs**, M. Virág Juhászné, M. Karsai, M. Breatotean, R. Drobot, A. Filip, M. Jianu, M. Minciuna, S. Brouyere, A. Dassargues, C. Popescu: Complex Hydrogeological Study of the Alluvial Transboundary Aquifer of Szamos/Somes (Romania-Hungary). XI. WORLD WATER CONGRESS, Water resources management in the 21th century. Subtheme 4, Relevance and sustainability of the intensive groundwater developments, 5-9 October 2003, Madrid, Spain, pp. 1-9.

- Zs. Nyári, **P. Szűcs**, P. Tildy:

Geophysical measurements for hydrogeological modelling in Hungarian freshwater protection programme. 9<sup>th</sup> Meeting of Environmental and Engineering Geophysics, ESGS (Environmental and Engineering Geophysical Society), EAGE (European Association of Geoscientists and Engineers), Prague, August 31 – September 4, 2003, P-024, pp. 1-4.

#### **2004.**

- **P. Szucs**, A. Toth:

Application of the most frequent value (MFV) method in groundwater modeling. microCAD 2004, International Scientific Conference, 18-19 March, 2004.

Miskolc-Egyetemváros, A: Környezettudomány, Földtudomány szekció, pp. 185-190.

- A. Dassargues, S. Brouyere, I. Popescu, L. Lenart, **P. Szucs**, T. Madarasz, A. Szabo, M. Bretotian, M. Minciuna, A. Filip, F. Nistea, A. Szendrei, S. Curtean, M. Virag, L. Miko: Common characterization of the transboundary aquifer of Some-Szamos river (Romania-Hungary).

BALWOIS, Conference on Water Observation and Information Systems for Decision Support, 25-29 May, 2004, Ohrid, Republic of Macedonia, pp. 1-11.

- **Szűcs P.**, Lénárt L.:

Egy Miskolc-Tapolcára tervezett termálkút barlangfürdő forrására és a miskolci termálkarsztra gyakorolt hatásának vizsgálata hidrodinamikai modellezéssel.

Mineral Waters in the Carpathian Basin, Scientific Conference. A Kárpát-medence Ásványvizei Tudományos Konferencia. Csíkszereda, Románia, 2004. július 29-31., ISBN 973-86876-0-8, pp. 46-55.

- **Szűcs P.**, Tóth A.:

Az MFV módszer lehetőségei a vízföldtani modellezésben.

„A felszín alatti víz, mint földtani tényező”, Vándorgyűlés, Magyarhoni Földtani Társulat, Magyar Hidrológiai Társaság, Egerszalók, 2004. október 1-3., pp. 14.

#### **2005.**

- **P. Szucs**, A. Toth, M. Virag, A. Fesus:

A new geostatistical tool ingroundwater modeling applications.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutionsm Perspectives, 3rd Volume, ISBN 5-98755-011-7. Ufa State Petroleum Technological University – Miskolc University. UFA 2004, pp. 225-232.

- Tóth J., Bódi T., **Szűcs P.**, Civan F. (a):

New calculation procedure to determine relative permeability curves of homogeneous and heterogeneous cores from laboratory displacement experiments.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutionsm Perspectives, 3rd Volume, ISBN 5-98755-011-7. Ufa State Petroleum Technological University – Miskolc University. UFA 2004, pp. 12-22.

- Lenart L., **Szűcs P.**, Tóth A., Faur K., Madarasz T., Virag M.:

The Hungarian aspects about the regional groundwater modeling of a transboundary aquifer.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutionsm Perspectives, 3rd Volume, ISBN 5-98755-011-7. Ufa State Petroleum Technological University – Miskolc University. UFA 2004, pp. 233-240.

- M.-N. MINCIUNA, A. FILIP, M. BRETOTEAN, F. NISTEA, A. SZENDREI, S. CURTEAN, T. MADARÁSZ, A. SZABÓ, **P. SZŰCS**:

Field campaigns: quantitative and qualitative characterization. Hidrotechnica Journal, Bucharest, Special issue dedicated to NATO SfP Project No. 973684; Vol. 49. Nr. 9-10., 2004, pp. 26-35.

- R. DROBOT, M. JIANU, N. SIRBU, M.-N. MINCIUNA, A. FILIP, M. BRETOTEAN, S. BROUYÈRE, A. DASSARGUES, I.-C. POPESCU, **P. SZŰCS**, M. KARSAI, A. TÓTH, K. FAUR, M. VIRÁG (2004):

Regional model of the Somes - Szamos aquifer (Ro - Hu). Hidrotechnica Journal, Bucharest, Special issue dedicated to NATO SfP Project No. 973684; Vol. 49. Nr. 9-10., 2004, pp. 58-66.

- **P. SZŰCS**, A. TÓTH, T. MADARÁSZ, K. FAUR, M. VIRÁG:

Local transport model: waste disposal of Fehérgyarmat. Hidrotechnica Journal, Bucharest, Special issue dedicated to NATO SfP Project No. 973684; Vol. 49. Nr. 9-10., 2004, pp. 67-72.

- **P. Szűcs**, A. Tóth:

A new geostatistical concept in hydrogeological calibration.

microCAD 2005, International Scientific Conference, Section C: Geology, Mineral Resources. March 10-11, 2005. pp. 65-70.

- **P. Szűcs**, L. Lénárt, A. Tóth:

The calibration results of the Szamos flow model.

microCAD 2005, International Scientific Conference, Section C: Geology, Mineral Resources. March 10-11, 2005. pp. 70-75.

- **Szűcs P.**, Lénárt L., Tóth A., Madarász T., Faur K., Virág M.:

Transzport modellezés Fehérgyarmat térségében a Szamos vízminősége védelmében.

Környezettudományi Konferencia, 2005. március 17-18, Kolozsvár, Románia, pp. 1-10.

- **P. Szucs**, Zs. Nyari:

A robust geostatistical method for geophysical investigation and groundwater modeling.

Geophysical Research Abstracts, Vol. 7, 03392, 2005. European Geosciences Union, General Assembly, Vienna, Austria, 24-29 April, 2005.

- T. Bodi, J. Toth, **P. Szucs**, F. Civan:

Interpretation of displacement data obtained from unsteady-state radial fluid flow systems.

D07 EAGE, European Association of Geoscientists and Engineers,

13<sup>th</sup> European Symposium on Improved Oil Recovery, Budapest, Hungary, 25-27 April, 2005. Proceedings ISBN 90-73781-39-6, pp. 1-10.

- **Szűcs P.**, Virág M.:

Geostatistikai módszerek alkalmazása a vízbázisvédelmi program végrehajtásában.

XXIII. Országos Vándorgyűlés, Magyar Hidrológiai Társaság, 2005. július 6-7, Nyíregyháza, Konferencia Kiadvány CD-én, pp. 1-17.

- Virág M., **Szűcs P.**, Lakatos A.:

Lokális vízföldtani modellek a Nyírség területén.

XXIII. Országos Vándorgyűlés, Magyar Hidrológiai Társaság, 2005. július 6-7, Nyíregyháza, Konferencia Kiadvány CD-én, pp. 1-15.

- **Szűcs P.**, Lénárt L., Török I., Horányiné Csiszár G.:

Ásványvíz- és gyógyvíz-potenciál a Bükk déli előterében.

A Kárpát-medence Ásványvizei II. Nemzetközi Tudományos Konferencia, Csíkszereda, 2005. július 28-30., Konferencia Kiadvány, ISBN 973-7625-01-3, pp. 49-59.

- T. Bodi, J. Toth, **P. Szucs**, F. Civan (b):

Fluid exchange process in radial system.

26th International Petroleum Conference, Tihany, Hungary, September 22-24. 2005, OMBKE, Proceedings, pp. 1-74.

- J. Toth, T. Bodi, **P. Szucs**, F. Civan:

Determining Relative Permeability from Unsteady-State Radial Fluid Displacements.

2005 SPE Annual Technical Conference and Exhibition held in Dallas, Texas, USA, 9-12 October 2005. SPE 94994, pp. 1-9.

## **2006.**

- **P. Szucs**, F. Civan, M. Virag:

Applicability of the most frequent value method in groundwater modeling.

Hydrogeology Journal (2006), 14: pp. 31-43. Springer-Verlag,



DOI 10.1007/s10040-004-0426-1

Impact factor: 0.948

- **P. Szucs**, L. Lenart, A. Somody, A. Toth:

The application of discrete Fourier transform to investigate hydraulic continuity.  
microCAD 2006, International Scientific Conference, 16-17 March 2006,  
Section C: Environmental Protection – Waste Management, pp. 123-128.

- A. Toth, **P. Szucs**:

Parametric vs nonparametric statistics in case of environmental data analysis.  
microCAD 2006, International Scientific Conference, 16-17 March 2006,  
Section C: Environmental Protection – Waste Management, pp. 135-140.

- **Szücs P.**, Madarász T., Illés I., Ulaga A., Béres L-né, Lossos L.:

A debreceni Nagyerdő többcélú vízpótlásának hidrodinamikai modellezése.

XIII. Konferencia a felszín alatti vizekről. 2006. március 29-30, Balatonfüred, Felszín Alatti Vizekért Alapítvány.

- **P. Szűcs**, F. Civan, A. Tóth:

Application of Geostatistics in Calibration of Groundwater Modeling.

István Lakatos (ed): „Managing Matured Fields and Wells”, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 6., Akadémiai Kiadó, 2005, ISBN 963 05 8301 1 (2005), pp. 195-209.

- **P. Szucs**, T. Madarász, Zs. Nyári, P. Scholtz, B. Neduczka, Sz. Halmóczki:

Improvement of Hydrogeophysical Methods to Detect Special Subsurface Contaminations.

Geophysical Research Abstracts, Vol. 8., 02584, 2006., European Geosciences Union, General Assembly, Vienna, Austria, 02-07 April 2006.

- **Szücs P.**, Madarász T., Lénárt L., Ilyés I.:

A debreceni Nagyerdő többcélú vízpótlásának komplex hidrogeológiai vizsgálata.

Bányászati, Kohászati és Földtani Konferencia, Sepsiszentgyörgy, 2006. április 6-9.,

Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, EMT, Bányászati-Kohászati-Földtani Szakosztály. pp. 303.

- **Szücs P.**, Tóth A., Virág M.:

A leggyakoribb érték (MFV) módszerének alkalmazása a hidrogeológiai modellezésben.

Hidroológiai Közlöny, 86. évf., 4. szám, 2006. július- augusztus., pp. 29-36.

- **Szücs P.**, Lénárt L., Kovács B., Horányiné Csiszár G.:

A hideg- és melegkarsztvizes rendszer sokváltozós geostatistikai elemzése Miskolc-Tapolcán.

A Kárpát-medence Ásványvizei III. Nemzetközi Tudományos Konferencia, Csíkszereda, 2006. július 28-29., Konferencia Kiadvány, ISBN 973-7625-06-4, pp. 25-34.

- Lénárt L., Kovács B., Horányiné Csiszár G., **Szűcs P.**:

A miskolc-tapolcai (Észak-Magyarország) termál-forrás vízhőmérsékletének változása.

A Kárpát-medence Ásványvizei III. Nemzetközi Tudományos Konferencia, Csíkszereda, 2006. július 28-29., Konferencia Kiadvány, ISBN 973-7625-06-4, pp. 107-121.

- B. Kovács, G. Szacsuri, **P. Szűcs**, L. Lénárt L., G. Csiszár Horányiné:

Determination of hydrogeologic protection area of the cold and warm karstic regime of Miskolc-Tapolca using numerical methods.

A Kárpát-medence Ásványvizei III. Nemzetközi Tudományos Konferencia, Csíkszereda, 2006. július 28-29., Konferencia Kiadvány, ISBN 973-7625-06-4, pp. 231-240.

- **P. Szucs**, T. Madarasz:

Complex hydrogeological modeling of multifunctional artificial recharge options of the Great-Forest Park in Debrecen, Hungary.

Water Pollution VIII, Modelling, Monitoring and Management.

Editors: C.A. Brebbia and J.S. Antunes do Carmo

WIT Press, 2006, pp. 177-184., ISBN: 1-84564-042-X.

- J. Toth, T. Bodi, **P. Szucs**, F. Civan:

Near-Well Bore Field Water-Oil Relative Permeability Inferred from Production with Increasing Water-Cut.

2006 SPE Annual Technical Conference and Exhibition held in San Antonio, Texas, USA, 24-27 September 2006. SPE 102312, pp. 1-10.

- Tóth J., Bódi T., **Szűcs P.**, F. Civan:

Kútkörzet diagnosztika vízkiszorítással művelt telepeknél.

Geofizikai – Földtani – Környezetvédelmi Vándorgyűlés és Kiállítás, Magyar Geofizikusok Egyesülete, Zalakaros, 2006. szeptember 21-23., Konferencia kiadvány, pp. 1-24.

- **Szűcs P.**, Madarász T., Ilyés I., Ulaga A., Béres Lászlóné, Lossos L.:

A debreceni Nagyerdő többcélú vízpótlásának szimulációja hidrodinamikai modellezéssel.

Geofizikai – Földtani – Környezetvédelmi Vándorgyűlés és Kiállítás, Magyar Geofizikusok Egyesülete, Zalakaros, 2006. szeptember 21-23., Konferencia kiadvány, pp. 1-11.

## **2007.**

- **P. Szucs (a)**:

The most frequent value method in groundwater modeling.

My Fulbright Experience. Könyvfejezet. Korrekt Nyomda, ISBN: 963 216 798 8, Budapest, 2007. pp. 121-135.

- R. N. Horne and **P. Szucs (a):**

Inferring Well-toWell Connectivity Using Nonparametric Regression on Well Histories.

PROCEEDINGS, Thirty-Second Workshop on Geothermal Engineering, Stanford University, Stanford, California, January 22-24, 2007, SPG-TR-183, pp. 1-8.

- J. Toth, T. Bodi, **P. Szucs** and Civan (a):

Well drainage area diagnostics at waterflooding.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutions, Perspectives, Proceedings, 4th Volume, ISBN: 978-963-661-761-5., University of Miskolc and UFA State Petroleum Technological University, 2007., pp. 1-12.

- **P. Szucs** and A. Toth:

A special application of the DFT method in hydrogeology.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutions, Perspectives, Proceedings, 4th Volume, ISBN: 978-963-661-761-5., University of Miskolc and UFA State Petroleum Technological University, 2007., pp. 136-139.

- **P. Szucs**, T. Madarász and A. Toth:

Complex hydrogeological modeling of multifunctional artificial recharge options of the Great-forest park in Debrecen, Hungary.

Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutions, Perspectives, Proceedings, 4th Volume, ISBN: 978-963-661-761-5., University of Miskolc and UFA State Petroleum Technological University, 2007., pp. 140-145.

- R. N. Horne and **P. Szucs (b):**

Inferring Well-toWell Connectivity Using Nonparametric Regression on Well Histories.

Proceedings, 28th Annual PNOC EDC Geothermal Conference, Makati City, Philippines, March 7-8, 2007, pp. 147-152.

- Zákányi B., **Szűcs P.:**

Gátszivárgás meghatározása SEEP2D modullal.

microCAD 2007, International Scientific Conference, University of Miskolc, Section B: Water management and Environmental Protection. ISBN: 978-963-661-744-8, pp. 185-190.

- **P. Szucs (b):**

The ACE Algorithm in Hydrogeology.

microCAD 2007, International Scientific Conference, University of Miskolc, Section B: Water management and Environmental Protection. ISBN: 978-963-661-744-8, pp. 143-148.

- Zákányi B., **Szücs P.**, Lénárt L.:

Árvízvédelmi gátak hidraulikai viszonyainak modellezése.

IX. Bányászati, Kohászati és Földtani Konferencia, Buziásfürdő, 2007. március 29 – április 1., EMT, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, pp. 286-291.

- **Szücs P.**, Madarász T., Lénárt L.:

A debreceni Nagyerdő vízháztartási viszonyainak javítása.

III. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia, 2007. március 29-31., Kolozsvár, Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, ISSN: 1842-9815. pp. 204-208.

- Lénárt L., **Szücs P.**:

Rendkívüli karsztvízszint kialakulása a Bükkben 2006 első felében.

III. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia, 2007. március 29-31., Kolozsvár, Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, ISSN: 1842-9815. pp. 334-339.

- **P. Szucs**, T. Madarasz, A. Toth, Zs. Nyari, B. Neducza, Sz. Halmoczki:

Combination of Hydrogeophysical Methods and Transport Modeling to Assess Special Subsurface Contaminants at a Hungarian Test Site.

Geophysical Research Abstracts, Vol. 9., 01544, 2007., European Geosciences Union, General Assembly, Vienna, Austria, 15-20 April 2007.

- **P. Szucs** and R.N, Horne:

The application of the ACE algorithm to interpret karst aquifer monitoring data.

Geophysical Research Abstracts, Vol. 9., 01538, 2007., European Geosciences Union, General Assembly, Vienna, Austria, 15-20 April 2007.

- **Szücs P.**, Tóth A, Zákányi B., Madarász T.:

Inverziós módszerek a hidrogeológiában.

Magyar Geofizika, 47. évf. 4. szám, pp. 169-172., 2006.

- Nyari Z., Neducza B., **Szucs P.**, Madarasz T., Halmoczky Sz.:

Non-invasive geophysical methods in environmental diagnostics of contaminated sites.

EAGE (European Association of Geoscientists and Engineers) 69<sup>th</sup> Conference and Exhibition – London, UK, 11-14 June 2007, E010, pp. 1-5.

- **Szücs P.**, Lénárt L., Török I., Horányiné Csiszár G.:

Ásványvíz és gyógyvíz potenciál a Bükk déli előterében.

Ásványvíz, üdítőital, gyümölcslé. Alkoholmentes italok, 2007, VIII. évfolyam, 2. szám, HU ISSN 1586-3581, pp. 27-31.

- **Szucs P**, Horne RN, Ritter Gy:

Inferring Well-to-Well Connectivity Using Nonparametric Regression on Well Histories.

A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat, 72. kötet, „IV. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről”, „Dr. Juhász József 80. születésnapjára”, Miskolci Egyetemi Kiadó, 2007, pp. 125-137.

- Virág M, **Szűcs P**, Lakatos A, Mikó L:

A Felső-Tisza-vidék ásvány- és hévízfeltárási lehetőségei.

A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat, 72. kötet, „IV. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről”, „Dr. Juhász József 80. születésnapjára”, Miskolci Egyetemi Kiadó, 2007, pp. 139-149.

- **Szűcs P**, Madarász T, Zákányi B:

Hidrodinamikai és transzport modellezés alkalmazása a Berhida és Péterfűrdő vízbázisok védelme érdekében.

A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat, 72. kötet, „IV. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről”, „Dr. Juhász József 80. születésnapjára”, Miskolci Egyetemi Kiadó, 2007, pp. 209-219.

- **Szűcs P**; Zákányi B:

A leggyakoribb érték (MFV) módszerének alkalmazása a hidrogeológiai modellezésben. pp. 161-174.

Mérnökgeológia, Kőzetmechanika 2007. Szerkesztette: Török Ákos, Vásárhelyi Balázs, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 4, ISBN 978-963-420-933-1. Műegyetemi Kiadó, 2007.

- **Szűcs P**; Tóth A; Horne R:

Application of Nonparametric Multiple Regression (ACE Algorithm) in Hydrogeology.

István Lakatos (ed): „Smart Fields, Smart Wells, and Smart Technologies”, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 7., Akadémiai Kiadó, 2007, ISBN 978 963 05 8550 7, pp. 213-235.

- **Szűcs P**; Madarász T; Zákányi B:

„Start” Modeling of Multifunctional Recharge Options for the Great-Forest Park in Debrecen.

István Lakatos (ed): „Smart Fields, Smart Wells, and Smart Technologies”, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 7., Akadémiai Kiadó, 2007, ISBN 978 963 05 8550 7, pp. 245-252.

- Tóth J; Bódi T; **Szűcs P**; Civan F (b):

Area Diagnosis of Well Drainage in Waterflooding.

István Lakatos (ed): „Smart Fields, Smart Wells, and Smart Technologies”, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 7., Akadémiai Kiadó, 2007, ISBN 978 963 05 8550 7, pp. 301-321.

## 8. Ábrajegyzék

<b>Ábraszám</b>	<b>Cím</b>	<b>Oldalszám</b>
1.	A kezdeti modellparaméter vektor javítása iterációs módszerrel a hibafüggvény minimuma felé haladva.	18
2.	A hagyományos optimalizációs algoritmusok hatékony működése nagymértékben függ modellparaméterek kezdeti értékeitől, az ún. start modelltől (Sen és Stoffa 1995).	20
3.	Kétdimenziós felület számos lokális és egy globális minimummal az $x = 0$ $y = 0$ helyen.	21
4.	A célfüggvény értékének alakulása egy jól működő és konvergáló SA algoritmus esetében rezervoármechanikai, illetve közetfizikai paraméterek meghatározása során (Szucs and Civan 1996).	23
5.	A $\chi^2$ -teszt elfogadási valószínűségei különböző anyaeloszlásból származó minták esetében hagyományos normalitás vizsgálat alkalmazásakor (Szucs 1997).	29
6.	A kalibrált, határral osztott Szamos hidrodinamikai modell mért és számított vízszintjei eloszlásának elemzése több mint 300 mérési hely figyelembevételével (Szucs, Lenart and Toth 1997).	30
7.	A hatásfok görbéje a legkisebb négyzetek és az MFV módszerre az $f_a(X)$ supermodell családból való hibaeloszlás esetén.	36
8.	A Bükkben létrehozott komplex hidrogeológiai monitoring rendszer elemei. (Lénárt 2006).	37
9.	Lineáris regresszió vízszint adatokra a legkisebb négyzetek és az MFV elv használatával.	38
10.	Próbaszivattyúzási adatok értékelésénél a vízföldtani paraméterek és azok bizonytalanságának meghatározása az MFV módszer és globális optimalizáció alkalmazásával.	40
11.	A leggyakoribb értékes inverziós (MFV-SA) eljárással kapott vízszintek az áramlási modellben.	47
12.	A MODFLOW-2000 PES inverziós eljárással kapott vízszintek az áramlási modellben.	49
13.	Kalibrált áramlási modell az 50 éves elérési időhöz tartozó védőövezet lehatárolásához a celldömölki vízmű esetében. Jobb oldalon az MFV súlyok két hisztogramja található a kalibrációs eljárás alatt. Fent a kalibráció egy korai, míg az alsó a kalibráció végén kapott hisztogramot mutat.	51
14.	A vizsgált, szintetikus módon előállított $y_j$ és $x_j$ adathalmaz ( $n=200$ ) az ACE algoritmus tesztelésére.	59
15.	Az $y_j$ függő változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformált értékei.	61
16.	Az $x_j$ független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformált értékei.	61
17.	Az összetartozó $\theta^*(y_j)$ és $\phi^*(x_j)$ érték párok az optimális transzformációt biztosító ACE algoritmus	62

	alkalmazása után.	
18.	Az ACE algoritmus által szolgáltatott optimális regressziós görbe az eredeti $x_j$ és $y_j$ kiindulási adatokkal	63
19.	A komplex hidrogeológiai vizsgálatba bevont monitoring kutak elhelyezkedése Miskolcon.	65
20.	Lineáris regressziós vizsgálat a Termál-forrás és az Új-kút vízszint adatai között.	66
21.	Lineáris regressziós vizsgálat a Termál-forrás és a Kertészeti-kút vízszint adatai között.	66
22.	Az $y_j$ függő változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.	68
23.	Az $x_{1j}$ független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.	68
24.	Az $x_{2j}$ független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.	69
25.	Az $x_{3j}$ független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.	69
26.	Az $x_{4j}$ független változó ACE algoritmus szerinti optimális transzformáltja.	70
27.	A transzformált függő változó értékei ( $ty_j$ ) a 4 független változó transzformáltjainak összege függvényében.	70
28.	A mért és az ACE algoritmus alapján számított vízszint adatok összehasonlítása a Termál-forrás esetében.	71
29.	A mért és a legkisebb négyzetes többváltozós lineáris regresszió alapján számított vízszint adatok összehasonlítása a Termál-forrás esetében.	72
30.	A mért és a leggyakoribb értékek elvére épülő többváltozós lineáris regresszió alapján számított vízszint adatok összehasonlítása a Termál-forrás esetében.	73
31.	Az $y_j$ függő változó optimális transzformáltja a 9 ACE transzformált független változó összegének függvényében (OK-7D termelőkút).	76
32.	A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (OK-7D termelőkút, 9 független változó).	76
33.	Az $y_j$ függő változó optimális transzformáltja a 10 ACE transzformált független változó összegének függvényében (OK-7D termelőkút).	77
34.	A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (OK-7D termelőkút, 10 független változó).	77
35.	Az $y_j$ függő változó optimális transzformáltja a 9 ACE transzformált független változó összegének függvényében (PN-31D termelőkút).	78
36.	A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (PN-31 termelőkút, 9 független változó).	78
37.	Az $y_j$ függő változó optimális transzformáltja a 10 ACE transzformált független változó összegének függvényében	79



	(PN-31D termelőkút).	
38.	A mért és az ACE algoritmus alapján számított klorid koncentráció értékek az idő függvényében (PN-31 termelőkút, 10 független változó).	79
39.	A Palinpinon-I geotermikus mező esetében a klorid koncentráció [ppm] adatok az OK-7 termelő kútban és besajtolási hozam [kg/s] adatok a PN-9RD visszasajtoló kútban (Sullera and Horne 2001).	82
40.	Az OK-7 termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja (vékony kék) valamint az idő (piros vonal) és a PN-9RD besajtoló kút hozamának (rózsaszín) ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.	84
41.	Az OK-7 termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja valamint az idő és az összes besajtoló kút hozamának ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.	85
42.	A PN-17D termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja (vékony kék) valamint az idő (piros vonal) és a PN-9RD besajtoló kút hozamának (rózsaszín) ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.	85
43.	A PN-17D termelő kút klorid koncentrációjának ACE transzformáltja valamint az idő és az összes besajtoló kút hozamának ACE transzformáltjai közötti kapcsolat.	86
44.	Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összefoglaló ábrája. Az egyes oszlopok hosszúsága a visszasajtolás hatását fejezi ki az adott termelőkútra. A jobb oldali rózsaszín szektorok az időfüggőség mértékét fejezik ki.	87
45.	Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összefoglaló ábrája jelezve a kutak közötti vezetőképesség nagyságát.	88
46.	Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összehasonlítása a nyomkövetési eljárások eredményei alapján számítottakkal a PN-1RD besajtoló kút esetében.	89
47.	Az ACE transzformáltak alapján számított vezetőképességi index értékek összehasonlítása a nyomkövetési eljárások eredményei alapján számítottakkal a PN-9RD besajtoló kút esetében.	89

## 9. Táblázatjegyzék

<b><u>Szám</u></b>	<b><u>Cím</u></b>	<b><u>Oldalszám</u></b>
1.	A MODFLOW-2000 PES és az MFV-SA módszerekkel kapott főbb eredmények 2 % geostatisztikai eloszlású hiba a megfigyelőpontokban mért vízszintekhez való hozzáadásával.	48
2.	Az OK-7D és PN-31D termelő kutakra végzett kiegyenlítési eljárások fontosabb statisztikai eredményei.	75
3.	Az ACE algoritmus alapján számított vezetőképességi indexek. Az egyes sorokban az egyes termelőkutak, míg az oszlopokban a besajtoló kutak és az idő szerepel.	86